



ESTIMATIVA DE PARÂMETROS DO MODELO DE CONDUÇÃO DE CALOR DE DUPLO RETARDO

Milena Vilar França

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientador: Helcio Rangel Barreto Orlande

Rio de Janeiro
Outubro de 2017

ESTIMATIVA DE PARÂMETROS DO MODELO DE CONDUÇÃO DE CALOR DE
DUPLO RETARDO

Milena Vilar França

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA MECÂNICA.

Examinada por:

Prof. Helcio Rangel Barreto Orlande, Ph.D.

Prof. Zaqueu Ernesto da Silva, Dr.

Prof^a. Carolina Palma Naveira-Cotta, D.Sc.

Prof. Leandro Alcoforado Sphaier, Ph.D.

Prof. Marcelo José Colaço, D.Sc

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

OUTUBRO DE 2017

França, Milena Vilar

Estimativa de Parâmetros do Modelo de Condução de Calor de Duplo Retardo / Milena Vilar França. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2017.

XXII, 169 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Helcio Rangel Barreto Orlande

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Mecânica, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 154-161.

1. Modelo de Condução de Duplo Retardo. 2. Micro e Nano Escala. 3. Estimativa de Parâmetros. 4. Problemas Inversos. 5. Inferência Bayesiana. I. Orlande, Helcio Rangel Barreto. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais Rosângela Maria Vilar e Kepler Borges França que desde o princípio esforçaram-se em tudo o que puderam para contribuir com a minha educação e formação de valores.

Agradeço ao meu irmão querido Rafael Vilar França que me sempre apoiou e me incentivou a concluir o doutorado.

Agradeço aos meus irmãos queridos Artur Cirne França e Elisa Cirne França que sempre me trouxeram incentivo e alegria nas pequenas coisas.

Agradeço ao meu tio Gutemberg França que sempre torceu para que eu concluísse esta etapa.

Agradeço ao meu padrasto Marcos Espínola e à minha madrasta Márcia Izabel Cirne França que são maravilhosos e sempre me apoiaram durante o doutorado.

Agradeço ao meu orientador Helcio Orlande.

Agradeço ao professor Zaqueu Ernesto e ao professor Albino Leiroz.

Agradeço às professoras Carolina Cotta e Renata Simão.

Agradeço aos funcionários do LTTC, Evanise, Júlio, Paulo César, Paulo Veiga e Luciana pela boa convivência diária.

Ao Programa de Engenharia Mecânica da COPPE/UFRJ e à nossa querida secretária da do programa, Vera Lúcia.

Agradeço às pessoas queridas que sempre me apoiaram: Lamien Bernard, Lalita Kraus, Bruno Calabria, Morena Felinto, Bruna Loiola, Mohsen Alaian, Masoud Kashani, Karen Quintana, Ana Paula Monterosso, Nilton Pereira, Paula Falchetto, Henrique Massard, Adriano Rossi, Raquel Gelli, Iasmin Herzog e Diogo Rodrigo Duarte.

A CAPES pelo incentivo financeiro.

*Aos meus pais Rosângela Maria
Vilar e Kepler Borges França, com
muito amor e carinho.*

“Conhecer não é demonstrar nem explicar. É alcançar a visão. Mas, para ver, convém primeiro participar. Trata-se de uma dura aprendizagem...” (Saint Exupéry)

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

ESTIMATIVA DE PARÂMETROS DO MODELO DE CONDUÇÃO DE CALOR DE DUPLO RETARDO

Milena Vilar França

Outubro/2017

Orientador: Helcio Rangel Barreto Orlande

Programa: Engenharia Mecânica

Esta tese de doutorado tem como objetivo a estimação de parâmetros do modelo de condução de duplo retardo (MCDR), em um problema bidimensional de condução de calor em um transistor do tipo MOSFET (*metal-oxide-semiconductor field-effect*), com uma condição de contorno que simula a difusão dos fônons na parede. Fez-se uso da solução de problemas inversos dentro de uma abordagem Bayesiana, através do Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov com medidas simuladas de temperatura. O problema inverso é focado na estimativa dos tempos de relaxação do vetor fluxo de calor e do gradiente de temperatura, que são parâmetros inerentes ao MCDR. Distribuições *a priori* uniformes foram atribuídas aos tempos de relaxação e distribuições *a priori* Gaussianas foram atribuídas aos demais parâmetros. Foram analisados dez casos onde se variou o ponto de partida das Cadeias de Markov e os níveis de incerteza das medidas simuladas. Estimativas indiretas para parâmetros do Modelo de Espalhamento de Fônons foram obtidas através de suas relações funcionais com os parâmetros do MCDR. Os intervalos de 99% de credibilidade dos parâmetros estimados contiveram os valores exatos usados para a geração das medidas experimentais simuladas. As incertezas associadas às soluções do problema direto com os parâmetros estimados foram obtidas com as cadeias de Markov, sendo menores do que aquelas das medidas simuladas.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

ESTIMATION OF PARAMETERS OF THE DUAL-PHASE-LAG MODEL FOR HEAT CONDUCTION

Milena Vilar França

October/2017

Advisor: Helcio Rangel Barreto Orlande

Department: Mechanical Engineering

This doctoral thesis aims at the estimation of parameters of the dual-phase-lag model (DPL), in a two-dimensional heat conduction problem in a MOSFET (metal-oxide-semiconductor field-effect) transistor, with a boundary condition that simulates phonon diffusion at the wall. The inverse problem is solved within the Bayesian framework, through the Markov chain Monte Carlo method with simulated temperature measurements. The inverse problem is focused on the estimation of the relaxation times for the heat flux vector and for the temperature gradient, which are parameters inherent of the dual-phase-lag model. Uniforms *prior* distributions were attributed to the relaxation times of the DPL heat conduction model, while Gaussian *prior* distributions were attributed to the other parameters. Ten cases were analyzed, where the initial states of Markov Chains and the uncertainty levels of the simulated measurements were varied. Indirect estimations of the Phonon Scattering Model parameters were obtained from their functional relations with the parameters of the DPL heat conduction model. The estimated 99% credibility intervals of the estimated parameters contained their exact values that were used to generate the simulated measurements. The uncertainties associated with the solution of the direct problem with the estimated parameters were obtained from the Markov chains, and are smaller than those associated with the simulated measurements.

SUMÁRIO

CAPÍTULO I	1
1. INTRODUÇÃO	1
1.1. Motivação	1
1.1.1. Mecanismos de transporte em pequenas escalas	4
1.1.2. Uso de modelos de transferência de calor para pequenas escalas	11
1.2. Estrutura da Tese	14
CAPÍTULO II	16
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DE MODELOS DE CONDUÇÃO DE CALOR	16
2.1. Lei de Fourier de Condução de Calor	16
2.2. Modelo Hiperbólico de Condução de Calor (MHCC) ou de Cattaneo-Vernotte (CV)	18
2.3. Modelo de Interação Elétron-Fônon (MIEF)	23
2.4. Modelo de Espalhamento de Fônons (MEF)	28
2.5. Modelo de Condução de Duplo Retardo (MCDR)	31
2.6. MHCC E MCDR em Bio transferência de Calor	45
2.7. Modelo Balístico Difusivo (MBD)	46
CAPÍTULO III	54
3. JUSTIFICATIVA E OBJETIVOS DO TRABALHO	54
3.1. Justificativa	54
3.2. Objetivos	58
Objetivo Geral	58
Objetivos Específicos	58

CAPÍTULO IV	59
4. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA DE PROBLEMAS INVERSOS	59
4.1. A Abordagem do Problema Inverso	59
4.1.1. Coeficientes de Sensibilidade	62
4.1.2. Projeto Ótimo de Experimentos	64
4.2. Problemas Inversos Via Inferência Bayesiana	65
4.3. Problemas Inversos em Transferência de Calor	67
4.3.1. Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov	71
CAPÍTULO V	77
5. PROBLEMA FÍSICO, FORMULAÇÃO MATEMÁTICA E MÉTODO DE SOLUÇÃO DO PROBLEMA DIRETO	77
5.1. Entendimento do Problema Físico	77
5.2. Problema Físico e Formulação Matemática do Problema 1	81
5.3. Problema Físico e Formulação Matemática do Problema 2	85
5.4. Método de Solução do Problema Direto	88
CAPÍTULO VI	90
6. ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA E VERIFICAÇÃO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA	90
6.1. Análise de Convergência da solução numérica do problema direto obtida através do COMSOL	90
6.2. Verificação do Problema Direto	95
CAPÍTULO VII	100
7. RESULTADOS	100
7.1. Solução do problema direto no ponto do sensor	101
7.2. Coeficientes de Sensibilidade	103
7.3. Otimização do Experimento	106
7.4. Estimativas obtidas através do Problema Inverso	109

CAPÍTULO VIII	150
8. CONCLUSÕES E SUGESTÕES	150
8.1. Conclusões	150
8.2. Sugestões para Trabalhos Futuros	152
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	154
APÊNDICE I	162
APÊNDICE II	165
APÊNDICE III	167
APÊNDICE IV	168

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1: Tendência de miniaturização sofrida por alguns dispositivos eletrônicos ao longo dos anos.....	2
Figura 1.2: Exemplo de um circuito eletrônico (a) e um transistor do tipo MOSFET (b).....	3
Figura 1.3: Aumento do número de transistores e da velocidade segundo a Lei de Moore	3
Figura 1.4: Ilustração dos conceitos de livre caminho médio e tempo de relaxação.....	6
Figura 1.5: Regimes de Condução - escala de tempo versus escala de comprimento do objeto. Fonte: Adaptada de Zhang (2007).....	9
Figura 1.6: Condução em filme fino.....	10
Figura 2.1: Mecanismos internos de interações entre fótons, elétrons e a estrutura do material.	25
Figura 2.2: Representação das interações dos fônons e mecanismos de espalhamentos.....	29
Figura 2.3: Diagrama representativo de causa (círculo) e efeito (seta) com relação ao Gradiente de Temperatura e o Fluxo de Calor no Modelo de Condução de Duplo Retardo.	32
Figura 2.4: Ilustração da “ponte” que o MCDR através das abordagens microscópica e macroscópica cobrindo vários modelos.....	37
Figura 2.5: Tempos característicos governando a transição do regime permanente, do modelo de Fourier, do modelo de Cattaneo-Vernotte e do MCDR.	38
Figura 4.1: Esquema ilustrativo do problema e do problema inverso.....	59
Figura 4.2: Fluxograma do Algoritmo de Metropolis-Hastings	74
Figura 5.1.: Arranjo entre os átomos de um semiconductor dopado tipo N (Figura a) e dopado tipo P (Figura b).	79
Figura 5.2: Transistor tipo MOSFET.	80
Figura 5.3: Esquema do problema físico abordado para a verificação da solução do MCDR obtida através do Comsol	81
Figura 5.4: Esquema do problema físico abordado.	85

Figura 5.5: Fonte de Calor – Tipo 1 - $Q_1 = \begin{cases} \left(\frac{Q_{\max}}{10}\right)t & \text{para } 0 \leq t < 10\text{ps} \\ 0 & \text{para } 10\text{ps} \leq t \end{cases} \dots 86$

Figura 5.6 Fonte de Calor – Tipo 2 - $Q_2(t) = \{0.5 + 0.5[(\tanh(12t))]\} Q_{\max} \dots 86$

Figura 6.1: Indicação dos pontos P₁, P₂, P₃, P₄ e P₅ na geometria do problema 91

Figura 6.2: Temperatura ao longo do tempo para os pontos P₁, P₂, P₃ P₄ e P₅ no caso de Kn=0.1 94

Figura 6.3: Temperatura ao longo do tempo para os pontos P₁, P₂, P₃ P₄ e P₅ no caso de Kn=1 94

Figura 6.4: Temperatura ao longo do tempo para os pontos P₁, P₂, P₃ P₄ e P₅ no caso de Kn=10 95

Figura 6.5: Comparação da solução de distribuição de temperatura adimensional ao longo da linha central via elementos finitos com a solução analítica de Ghazanfarian e Abbassi, 2012, para Kn=0.1 97

Figura 6.6: Comparação da solução de distribuição de temperatura adimensional ao longo da linha central via elementos finitos com a solução analítica de Ghazanfarian e Abbassi, 2012, para Kn=1 97

Figura 6.7: Comparação da solução de distribuição de temperatura adimensional ao longo da linha central via elementos finitos com a solução analítica de Ghazanfarian e Abbassi, 2012, para Kn=10 98

Figura 6.8: Linhas isotermas de temperatura adimensional para Kn=10 em t*=1 para o modelo de duplo retardo 98

Figura 6.9: Linhas isotermas de temperatura adimensional para Kn=10 em t*=1 para o modelo clássico de difusão 99

Figura 7.1: Solução do problema direto no ponto P₄(5,5) com a fonte do tipo 1 102

Figura 7.2: Mapa de Temperatura Adimensional na superfície do transistor no tempo t* =12 102

Figura 7.3: Solução do problema direto no ponto P₄(5,5) com a fonte do tipo 2 103

Figura 7.4: Coeficientes de sensibilidade reduzidos e temperatura no ponto P₄(5,5) utilizando a fonte do tipo 1 104

Figura 7.5: Coeficientes de sensibilidade reduzidos e temperatura no ponto $P_4(5,5)$ utilizando a fonte do tipo 2.....	105
Figura 7.6: Evolução do Determinante da Matriz de Informação de Fisher para a fonte do tipo 1	107
Figura 7.7: Evolução do Determinante da Matriz de Informação de Fisher para fonte do tipo 2.....	108
Figura 7.8: Cadeias de Markov para o Caso 3.....	113
Figura 7.9: Cadeias de Markov para o Caso 4.....	114
Figura 7.10: Cadeias de Markov para o Caso 5.....	114
Figura 7.11: Cadeias de Markov para o Caso 6.....	115
Figura 7.12: Histogramas do Caso 3	116
Figura 7.13: Histogramas do Caso 4	116
Figura 7.14.: Histogramas do Caso 5	117
Figura 7.15: Histogramas do Caso 6	117
Figura 7.16: Função de Auto covariância – Caso 3.....	118
Figura 7.17: Função de Auto covariância – Caso 4.....	119
Figura 7.18 Função de Auto covariância – Caso 5.....	119
Figura 7.19: Função de Auto covariância – Caso 6.....	120
Figura 7.20: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 3.....	121
Figura 7.21: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 4.....	121
Figura 7.22 Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 5.....	122
Figura 7.23: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 6.....	122
Figura 7.24: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 3	123
Figura 7.25 Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 4	124
Figura 7.26: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 5	124
Figura 7.27: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 6	125

Figura 7.28: Comparação das Soluções obtidas pelos parâmetros exatos, parâmetros estimados, média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 3	126
Figura 7.29: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 4	127
Figura 7.30: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 5	127
Figura 7.31: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 6	128
Figura 7.32: Cadeias de Markov– Caso 7	133
Figura 7.33: Cadeias de Markov– Caso 8	134
Figura 7.34: Cadeias de Markov para o Caso 9.....	135
Figura 7.35: Cadeias de Markov para o Caso 10.....	135
Figura 7.36: Histogramas– Caso 7	136
Figura 7.37: Histogramas– Caso 8	137
Figura 7.38: Histogramas do Caso 9	137
Figura 7.39: Histogramas do Caso 10	138
Figura 7.40: Função de Autocovariância– Caso 7.....	139
Figura 7.41: Função de Auto covariância– Caso 8.....	139
Figura 7.42: Função de Auto covariância– Caso 9.....	140
Figura 7.43: Função de Auto covariância– Caso 10.....	140
Figura 7.44: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 7.....	141
Figura 7.45: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 8.....	142
Figura 7.46: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 9.....	142

Figura 7.47: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 10.....	143
Figura 7.48: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 7.....	144
Figura 7.49 Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 8.....	144
Figura 7.50: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 9.....	145
Figura 7.51 Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 10.....	145
Figura 7.52: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 7.....	147
Figura 7.53: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 8.....	147
Figura 7.54: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 9.....	148
Figura 7.55: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 10.....	148

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1.1: Estimativas de valores médios para o livre caminho médio e o tempo de relaxação de transportadores de energia. (Dados retirados de Tzou (2015) e G. Chen <i>et al.</i> (2004)).	6
Tabela 1.2: Comprimentos e tempos característicos para cada regime. (Dados retirados de Anderson (2008))	10
Tabela 1.3: Tabela apresentada por Ghazanfarian <i>et al.</i> (2015) sobre a distribuição de 404 publicações envolvendo o Modelo de Duplo Retardo em Livros e Artigos de Revisão, acerca da Fundamentação Teórica e Métodos de Solução Utilizados e suas devidas aplicações.	13
Tabela 2.1: Correspondência dos coeficientes do MCDR com demais modelos. (Adaptada de Tzou, 2015).	36
Tabela 5.1: Propriedades do Si (Taur, <i>et al.</i> 1998; Yang, <i>et al.</i> 2005; Ghazanfarian e Abbassi, 2012), do SiO ₂ (Goodson e Flik, 1992)	89
Tabela 5.2: Parâmetros utilizados (Taur, <i>et al.</i> 1998; Yang, <i>et al.</i> 2005; Ghazanfarian e Abbassi, 2012), do SiO ₂ (Goodson e Flik, 1992)	89
Tabela 6.1: Malhas pré-definidas pelo Comsol para discretização por elementos finitos	92
Tabela 6.2: Resultados obtidos alterando o refinamento da região 2	93
Tabela 7.1. Parâmetros Adimensionais utilizados neste trabalho (Yang <i>et al.</i> , (2005), Ghazanfarian e Shomalli (2012))	110
Tabela 7.2. Casos analisados	111
Tabela 7.3. Resultados da estimação de parâmetros via Problemas inversos para os casos apresentados na Tabela 7.2	112
Tabela 7.4- Estimativa dimensional dos parâmetros do MCDR para os casos 1 – 6.	129
Tabela 7.5- Estimativa indireta dimensional dos parâmetros do MEF para os casos 1 – 6.	129
Tabela 7.6- Casos analisados 7 a 10	131
Tabela 7.7 Resultados da estimação de parâmetros via problemas inversos para os casos apresentados na Tabela 7.6	132

Tabela 7.8- Estimativa dimensional dos parâmetros do MCDR para os casos 7 a 10.	149
Tabela 7.9- Estimativa indireta dimensional dos parâmetros do MEF para os casos 7 a 10.....	149

NOMENCLATURA

A_T	Velocidade da onda descrita pelo MHCC
B	Divisão entre os tempos de relaxação do MCDR
c	Velocidade do som
c_p	Calor específico à pressão constante
C	Capacidade térmica volumétrica
d_1	Coefficiente ajustável
d_2	Coefficiente ajustável
E	Energia
f	Função da distribuição de probabilidade
F	Matriz de Informação de Fisher
g	Termo fonte
G	Fator de acoplamento entre fônons e elétrons
h_p	Constante de Planck
I	Intensidade dos transportadores de calor
$I_{0\omega}$	Função de distribuição de equilíbrio
$I_{b\omega}$	Função de distribuição de transportadores de calor referente à parte balística
$I_{m\omega}$	Função de distribuição dos transportadores de calor referente à parte difusiva
J	Matriz de Sensibilidade
k	Condutividade térmica
Kn	Número de Knudsen
L_h	Comprimento característico
m	massa
\mathbf{n}	Vetor unitário normal ao contorno

n_e	Número de densidade de elétrons
\mathbf{p}	Vetor de parâmetros desconhecidos
P_r	Número de Prandtl
q	Distribuição proposta
\mathbf{q}	Vetor fluxo de calor
\mathbf{r}	Vetor posição
R	Coeficiente de reflexão
s	Número de estados da cadeia
t	Tempo
T	Temperatura
T_0	Temperatura de referência
T_w	Temperatura na parede
$\mathbf{T}(\mathbf{P})$	Vetor de temperaturas do problema direto
\mathbf{W}	Matriz inversa de covariância
u	Energia interna total
U	Distribuição uniforme
V	Volume
var	Variância
\mathbf{Y}	Vetor de medidas simuladas de temperatura

Símbolos Gregos

α	Difusividade térmica
ρ	Massa específica
ρ_{ff}	Função normalidade de auto covariância

Λ	Livre caminho médio
γ	Taxa de calor específico
σ	Desvio padrão
τ	Tempo de relaxação
τ_{corr}	Tempo integrado de correlação
ν	Frequência da vibração da rede
U	Velocidade dos transportadores de calor
ω	Frequência angular (Capítulo II)
ω	variável randômica (Capítulo III)
Ω	vetor unitário na direção de propagação

Subscritos

0	Refere-se ao tempo inicial
e	Elétrons
f	Fônons
H	Referente à temperatura do aquecedor
l	Lattice
b	Denota componente balística
m	Denota componente difusiva
i	Índice da matriz de sensibilidade
j	Índice da matriz de sensibilidade
m	Índice da matriz de informação de Fisher
n	Índice da matriz de informação de Fisher
N	Refere-se ao índice do tempo de relaxação do MEF

P	Ponto
o	Estado de equilíbrio
q	Índice do tempo de relaxação do fluxo de calor
R	Refere-se ao índice do tempo de relaxação do MEF
ref	Denota referência
s	Refere-se à temperatura de salto
T	Índice do tempo de relaxação do gradiente de temperatura
w	Refere-se à temperatura da parede

Sobrescritos

t	Estado atual
*	Refere-se aos parâmetros adimensionais

Siglas

ETB	Equação de transporte de Boltzmann
MBD	Modelo balístico difusivo
MCDR	Modelo de condução de duplo retardo
MEF	Modelo de espalhamento de Fônons
MHCC	Modelo hiperbólico de condução de calor
MIEF	Modelo de interação Elétron – Fônon
MPCC	Modelo parabólico de condução de calor

CAPÍTULO I

1. INTRODUÇÃO

Este primeiro capítulo oferece conceitos básicos necessários para o entendimento da transferência de calor em pequenas escalas, como também são apresentados os motivos pelos quais surgiu o interesse para realização desta pesquisa. Ao final deste capítulo é apresentada a estrutura desta tese de doutorado.

1.1. Motivação

Com a tendência generalizada à miniaturização sendo verificada em diversas áreas da ciência e tecnologia, tais como eletricidade, mecânica, eletrônica, biologia, medicina, química, mecânica dos fluidos, etc. (OECD, 1998), faz-se necessário entender melhor como funcionam os diversos fenômenos físicos em micro e nano escala. A miniaturização convive com propriedades diferentes daquelas conhecidas na macro escala (Batalha, G. *et al*, 2005) possibilitando aplicações inovadoras em áreas da tecnologia, seja pelo tamanho, como ocorre, por exemplo, em aplicações médicas, ou pela possibilidade de compactação de dispositivos para aplicações móveis ou remotas, ou ainda aumento de velocidade e poder de processamento de dados, como na eletrônica (Dimov e Menz, 2005).

Na atualidade o uso da tecnologia se tornou de uso rotineiro em várias atividades diárias da sociedade, como por exemplo, no uso de computadores e celulares, que por sua vez são compostos de circuitos eletrônicos integrados que também sofreram e sofrem processos de miniaturização. A Figura 1.1 mostra a tendência à miniaturização sofrida por alguns dispositivos eletrônicos ao longo dos anos.

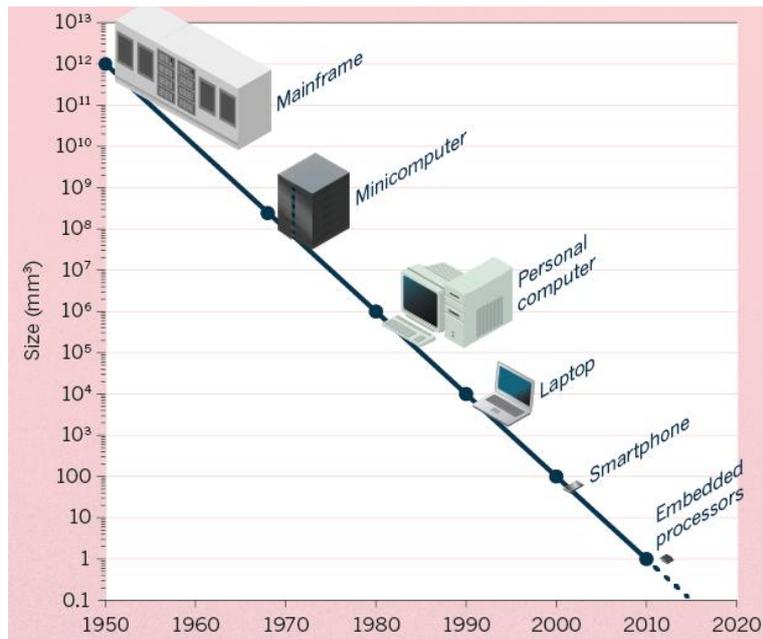


Figura 1.1: Tendência de miniaturização sofrida por alguns dispositivos eletrônicos ao longo dos anos

Fonte: Waldrop (2016)

Um circuito eletrônico é formado por dispositivos feitos de semicondutores, que têm o propósito de manipular informação através de uma taxa de transporte de cargas elétricas, que ao serem transportadas geram calor. Em particular, a indústria dos semicondutores lida com a necessidade de miniaturização para melhorar a portabilidade como também aumentar a velocidade no uso dos seus produtos, bem como diminuir a quantidade de energia necessária para o seu uso em busca de aumentar seu desempenho (Wildstrom, 2004). Na miniaturização dos dispositivos eletrônicos, a quantidade de transistores em um único *chip* funcionando em alta velocidade faz com que o consumo de energia seja grande e que a geração de calor também. Portanto, a dissipação de potência limita seu desempenho.

A Figura 1.2 mostra um exemplo de circuito eletrônico (a) e um exemplo de transistor do tipo MOSFET (*metal-oxide-semiconductor field effect*) (b). Apesar do exemplo mostrado na Figura 1.2(b) já ser pequeno, como se vê na figura, existem transistores com dimensões na nanoescala. Em 1965, o então presidente da Intel, Gordon E. Moore, criou um conceito no qual o número de transistores dos chips teria um aumento de 100%, pelo mesmo custo, a cada período de 18 meses, que acabou ficando conhecida como Lei de Moore. Alguns estudos indicam que a Lei de Moore não será mais válida daqui a alguns anos. A

Figura 1.3 mostra que o aumento do número de transistores por chip ao longo dos anos vem obedecendo a lei de Moore. Também podemos observar na Figura 1.3 o comportamento da velocidade de operação destes dispositivos ao longo dos anos que não apresenta aumento significativo nos últimos anos. Portanto, é de interesse da indústria eletrônica o entendimento dos processos em micro e nano escalas. Surge então um interesse científico no estudo minucioso da transferência de calor em nano escala nestes dispositivos, visando desenvolver métodos para prolongar sua vida útil (Norris, 2014). Desta maneira, é preciso compreender como ocorre o transporte de energia nestas escalas, que se dá essencialmente pela interação de elétrons livres, fônons e fótons (Carey *et al.* 2008).

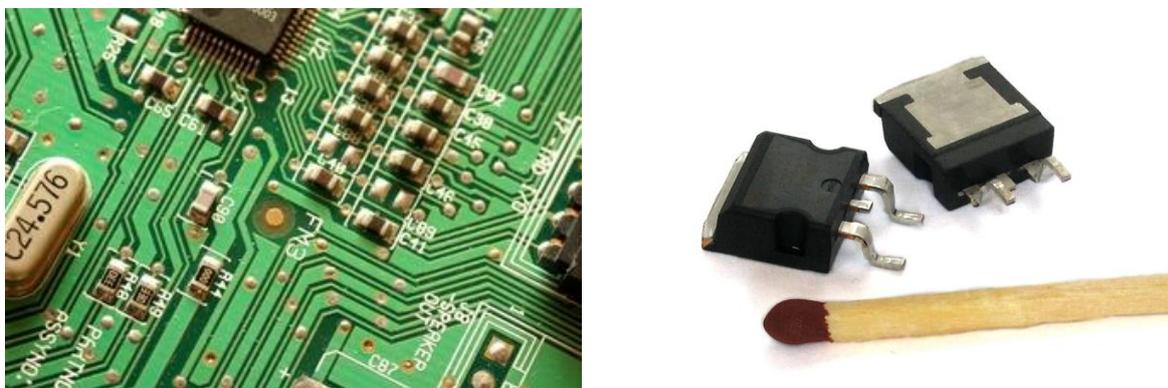


Figura 1.2: Exemplo de um circuito eletrônico (a) e um transistor do tipo MOSFET (b)

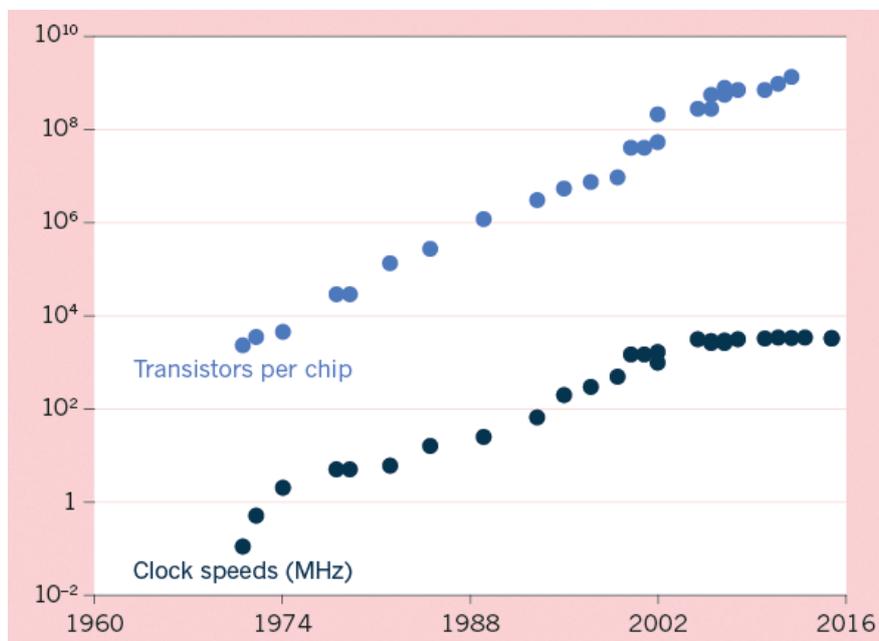


Figura 1.3: Aumento do número de transistores e da velocidade segundo a Lei de Moore

Fonte: Waldrop (2016)

O item 1.1.1 deste Capítulo destina-se a fornecer ao leitor conceitos básicos dos mecanismos de transporte em pequenas escalas.

1.1.1. Mecanismos de transporte em pequenas escalas

O transporte de calor por condução necessita de um número de colisões suficientes entre os transportadores de energia, independentemente do meio condutor. Dependendo do tipo de sólido, diferentes partículas chamadas de transportadores de calor, transferem o calor no material de diferentes maneiras. Nos metais a energia é transportada por elétrons e fônons, sendo, contudo, o primeiro seu principal transportador de energia. Em cristais dielétricos, isolantes e em semicondutores, predomina o transporte de energia através dos fônons (Tien e Chen, 1992; Tzou, 2015; Incropera, 2008).

Uma nuvem de fônons pode ser vista como um grupo de “partículas de massa” que através de vibrações caracterizam o estado de energia da rede do material (Tzou, 2015). Para descrever a estrutura de um material cristalino utilizam-se os termos: rede e base. A rede cristalina (*lattice* em inglês) é definida como uma coleção de pontos em arranjos periódicos no espaço, enquanto a base é o conjunto de átomos (íons ou moléculas) ligados a cada ponto da rede. Em materiais sólidos, as excitações da matéria, que ocorrem através da vibração coletiva dos íons, possuem caráter de onda sendo, portanto, quantizadas. Desta maneira, um quantum de vibração de rede é um pacote de onda elástica que recebe o nome de fônon (Rezende, 2004). O quantum de uma onda tem comportamento tanto de onda quanto de partícula. Portanto, para uma rede metálica vibrando com frequência ν a uma dada temperatura T , o seu estado de energia, e consequentemente do fônon, é dado por (Tzou, 2015; Rezende, 2004):

$$E = h_p \nu \tag{1.1}$$

onde h_p é a constante de Planck e ν a frequência de vibração da rede que é da ordem de 10^{13} s^{-1} a temperatura ambiente.

De acordo com Goodson e Flik (1992), existem cinco parâmetros de tempo que governam o transporte de calor na microescala: o tempo de termalização, que é o tempo para os elétrons e a estrutura do material atinjam o equilíbrio; o tempo de difusão, que é o tempo

que a informação leva para viajar através do meio; o tempo de relaxação que é o tempo associado com a velocidade de um distúrbio térmico no meio; o tempo de aquecimento que é o tempo que uma fonte aquece o meio; e por fim, o tempo físico que é a duração do tempo total de interesse de algum fenômeno. Quando o tempo de processo é comparável a quaisquer destes tempos, o processo é considerado microscópico no tempo.

Como já dito, o transporte de energia por condução ocorre devido a uma série de colisões entre os transportadores durante certo período de tempo. A distância que um transportador de energia percorre entre duas colisões sucessivas é chamada de livre caminho médio, que aqui será representado por Λ . Para elétrons, Λ é na ordem de 10 nm à temperatura ambiente enquanto que para fônons, este valor se encontra na faixa de 10^1 - 10^2 nm. Existem, portanto, dois parâmetros de tamanho importantes que governam a transferência de calor em um meio: o livre caminho médio e o comprimento característico de um material. O tempo que um transportador percorre o livre caminho médio, τ , é chamado tempo de relaxação e se encontra na faixa de picosegundos para metais, enquanto que para cristais dielétricos e isolantes este tempo é um pouco maior, entre nano e picosegundos (Tzou, 2015). Outros termos comumente utilizados para o tempo de relaxação entre os transportadores de energia é tempo de colisão e tempo médio livre, porém neste texto será utilizado apenas o primeiro termo. A Figura 1.4 fornece uma ilustração sob a ideia dos conceitos de caminho médio livre e do tempo de relaxação entre os transportadores de energia, enquanto a Tabela 1.1 sintetiza os valores, descritos neste parágrafo, do comprimento de onda, dos livres caminhos médios e dos tempos de relaxação.

Para entender o conceito de livre caminho médio e o que acontece com a frequência de vibração da rede após cada colisão, na Fig.1.4 acompanhamos a trajetória do fônon 1 que está representado por uma partícula (cujo preenchimento muda após cada colisão) que colide com os fônons 2, 3 e 4 que estão representados por partículas com as cores azul, verde e vermelho respectivamente. A frequência de vibração da rede, ν , e o livre caminho médio, Λ , são funções, da temperatura. Na Fig. 1.4 o fônon 1 após colidir com o fônon 2 no tempo t_0 muda sua frequência de vibração, já que energia é transferida para o fônon 2, passando, portanto, a ter outra frequência de vibração no tempo t_1 , quando colide com o fônon 3. Este processo continua para as colisões subsequentes. Na Fig. 1.4 a mudança da frequência de vibração do fônon 1 foi representada de acordo a ilustração do seu preenchimento, como mostrado na legenda. A velocidade média dos transportadores de

energia, v é a velocidade que o transportador percorre a distância Λ no tempo τ . Deve-se ressaltar que o esquema apresentado na Figura 1.4 tem caráter apenas ilustrativo, visto que não se pode definir um fônon como uma partícula, já que é a energia quanta vibracional da rede.

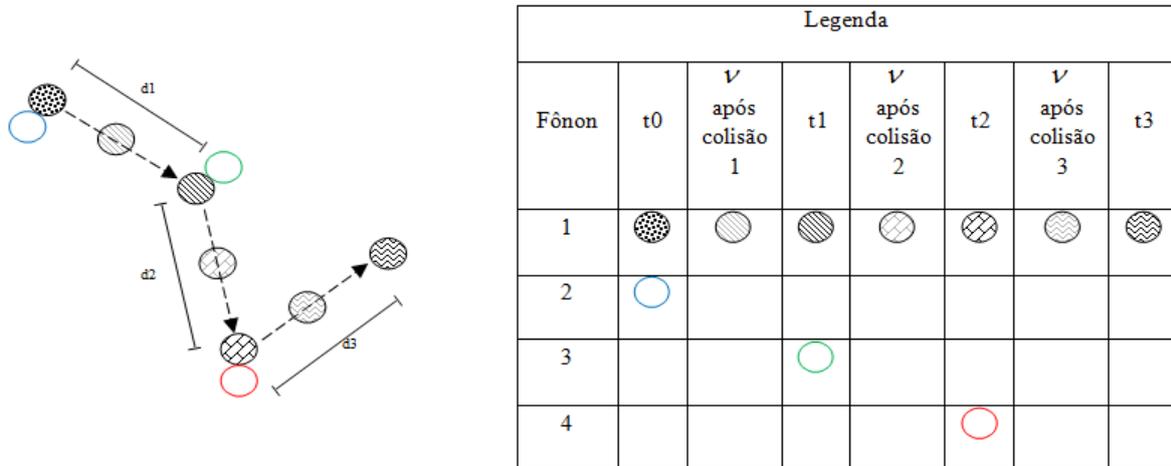


Figura 1.4: Ilustração dos conceitos de livre caminho médio e tempo de relaxação

Tabela 1.1: Estimativas de valores médios para o livre caminho médio e o tempo de relaxação de transportadores de energia. (Dados retirados de Tzou (2015) e G. Chen *et al.* (2004)).

Transportador de energia	Comprimento de onda característico (a 300K)	Livre caminho médio	Tempo de relaxação
Elétron	Na ordem de 10nm	Da ordem de 10nm	Na faixa de 10^{-15} s
Fônon	Na ordem de 1nm	Na ordem de 10^1 - 10^2 nm	Na faixa de 10^{-9} s e 10^{-12} s

Observa-se na Tabela 1.1 que o livre caminho médio do elétron é maior que o do fônon, $\Lambda_e > \Lambda_f$, e que o tempo de relaxação do elétron é menor que o do fônon. Tendo, portanto, o elétron uma velocidade maior que a do fônon.

Na Figura 1.4 Λ e τ são calculados como $\frac{d_1+d_2+d_3}{3}$ e $\frac{t_1+t_2+t_3}{3}$ respectivamente, uma média em relação a poucas colisões apenas para mérito ilustrativo dos conceitos. No entanto, para se obter valores significativos para Λ , τ e ν deve-se ter um número suficientemente grande de colisões desenvolvidas no tempo para que, assim, a distribuição de momento e energia se tornem estatisticamente mais significativas e os valores desejados se aproximem de valores constantes. Portanto, o tempo para se alcançar esse número de colisões é chamado de tempo de estabilização. Uma vez atingido este tempo, pode se dizer que ocorre plenamente a condução entre fônons, ou elétrons, por exemplo.

O modelo macroscópico assume que o domínio físico envolvido é grande o suficiente para que milhares de colisões tenham ocorrido antes que uma observação do processo seja feita. Sendo assim, o modelo macroscópico necessita tanto de um domínio físico grande como de um tempo suficientemente grande, para que a condução de calor ocorra. Quando o livre caminho médio é muito menor que o comprimento característico do meio em estudo, a transferência de calor é dita macroscópica. Quando o livre caminho médio é da ordem ou muito menor que o comprimento característico do meio em estudo, a transferência de calor é dita como microscópica.

Os regimes na condução de calor, temporal e espacial, podem ser divididos em: Macroescala, Mesoescala, Microescala e Nanoescala. Contudo, as duas maiores áreas denominadas na literatura são: a macroescala, que envolve os efeitos modelados da macroescala e a microescala que engloba todos os outros regimes (Anderson, 2008). Portanto, em geral neste texto se utilizará do termo microescala para referir-se também à nanoescala. Na macroescala supõe-se que o calor é transportado pelos átomos enquanto que na microescala se devem considerar mecanismos físicos de transporte onde a dependência do tamanho e do tempo são cruciais (Anderson, 2008).

A Figura 1.5, adaptada de Zhang (2007), apresenta um gráfico que relaciona os regimes de condução de calor com a escala de tempo e a escala de comprimento do objeto estudado. A região 1 da Figura 1.5 representa a Macroescala onde o modelo parabólico de condução de calor, também conhecido como modelo clássico de difusão de Fourier, que está baseado na relação constitutiva de Fourier, descreve a relação entre o fluxo de calor por condução e o gradiente de temperatura. Nesta região considera-se o equilíbrio local como sendo contínuo, em situações onde a escala de tempo é maior que o tempo de relaxação e a

escala de comprimento é cerca de dez vezes maior que o livre caminho médio (Zhang, 2007). A região 2 representa a Mesoescala onde estão os problemas em que o comprimento de escala é maior que o comprimento de onda dos transportadores de calor e a escala de tempo é maior que o tempo de relaxação. Assim, podem ser tratados problemas de quase equilíbrio, difusão balística, equação de transporte de Boltzmann (com aproximação do tempo de relaxação), método de Monte Carlo e salto de temperatura. A região 3 é a classe de problemas onde a escala de comprimento é menor que o comprimento de onda dos transportadores de calor, apresentando, portanto um regime com comportamento de onda. Neste caso, os problemas são resolvidos pela equação de onda de Schroedinger. A região 4 representa o regime com comportamento como de uma onda, compreendido pelos problemas que envolvem a equação do tipo de Jeffreys que foi uma equação originalmente desenvolvida no início do século XX para relacionar a deformação com a tensão no manto da terra (Zhang, 2007). Este regime inclui propagação de pulsos de calor e segundo som em cristais dielétricos à baixas temperaturas e também a equação de Boltzmann baseados em dois tempos de relaxação. Os estudos baseados na equação hiperbólica de calor ajudaram a compreender o comportamento da transferência de calor em pequenos tempos e também a desenvolver modelos matematicamente mais completos do que o modelo de Fourier. A equação do modelo de duplo retardo consegue descrever simultaneamente o comportamento de onda e a condução de calor paralela. A região 5 compreende o regime em nano escala, onde é necessário empregar o quantum ou a dinâmica molecular clássica para estudar os fenômenos ocorridos. O pontilhado, que forma uma elipse, designa uma área onde há uma sobreposição de regiões, podendo a dinâmica molecular clássica atuar como também designa uma ponte entre diferentes escalas de tempo e de comprimento. A região 6 é dita como uma região de não interesse para pequenos tempos já que a perturbação térmica não pode viajar tão rápido e afetar o campo de temperatura.

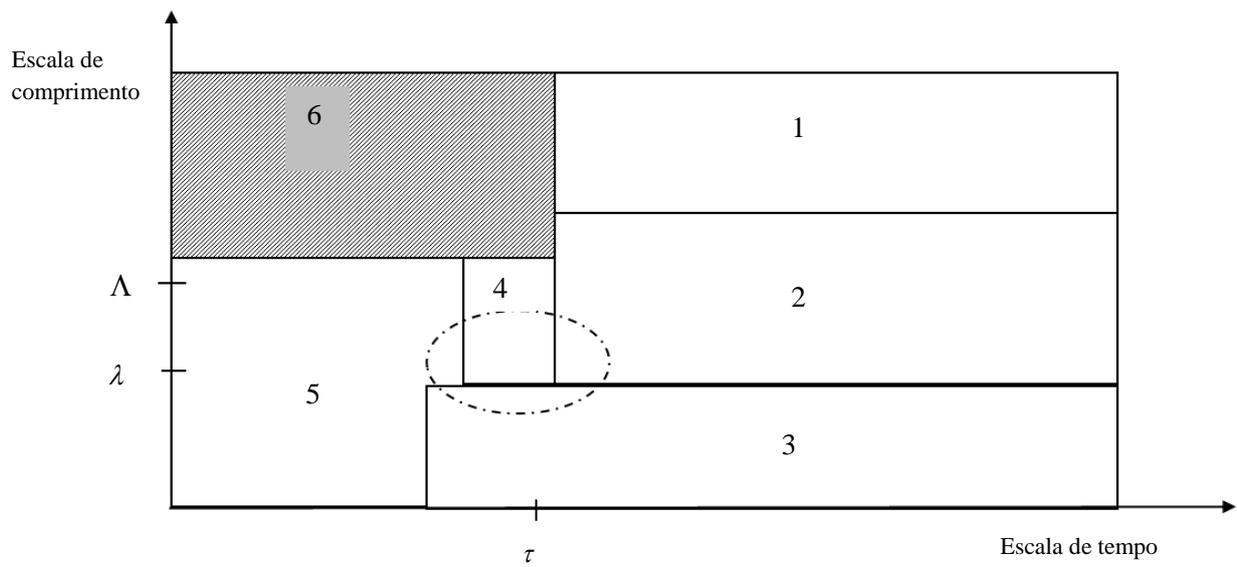


Figura 1.5: Regimes de Condução - escala de tempo versus escala de comprimento do objeto. Fonte: Adaptada de Zhang (2007)

A Tabela 1.2 traz um resumo sobre os comprimentos e tempos característicos na modelagem da transferência de calor em materiais para cada regime.

Tabela 1.2: Comprimentos e tempos característicos para cada regime. (Dados retirados de Anderson (2008))

Regime	Comprimento Característico	Tempo Característico
Macroescala	$\geq 10^{-3} \text{ m}$	$\geq 10^{-3} \text{ s}$
Mesoescala	$10^{-7} - 10^{-4} \text{ m}$	$10^{-9} - 10^{-3} \text{ s}$
Microescala	$10^{-8} - 10^{-6} \text{ m}$	$10^{-11} - 10^{-8} \text{ s}$
Nanoescala	$10^{-9} - 10^{-7} \text{ m}$	$10^{-14} - 10^{-10} \text{ s}$

O conceito de gradiente de temperatura da macroescala perde o seu sentido quando o domínio físico é menor ou na mesma ordem de grandeza que o livre caminho médio. Para ilustrar tal fato observa-se a Figura 1.6, adaptada de Tzou (2015), que mostra um filme fino com espessura da mesma ordem do livre caminho médio.

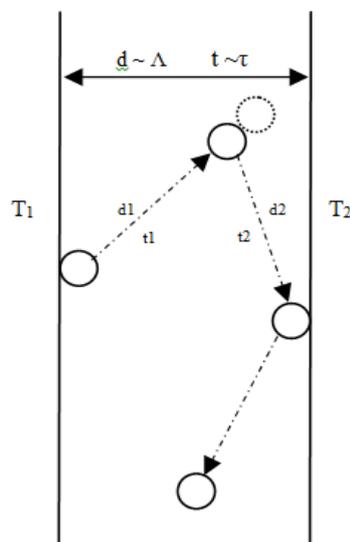


Figura 1.6: Condução em filme fino

Fonte: Adaptada de Tzou (2015)

Se o gradiente de temperatura da Figura 1.3 for calculado de forma aproximada como $\frac{T_2 - T_1}{d}$, este não terá o seu significado físico, pois neste caso não existe um número suficiente de transportadores de energia entre as duas superfícies do filme e o campo de temperatura é descontínuo ao longo da espessura do filme. Sendo assim, uma vez que o campo de temperatura é descontínuo, não faz sentido em definir o fluxo de calor da maneira convencional que a macroescala propõe como também não definir a temperatura como sendo uma temperatura de equilíbrio. Portanto, as ambiguidades nos conceitos de gradiente de temperatura e fluxo de calor são tidos como o primeiro desafio do efeito da microescala no espaço contra as teorias convencionais da macroescala (Tzou, 2015). Da mesma maneira, o tempo de resposta típico em um filme fino será da mesma ordem de grandeza do tempo de relaxação. Sendo assim, o tempo de resposta do gradiente de temperatura ou do fluxo de calor é da mesma ordem do tempo de relaxação e então o efeito individual da interação entre fônons e o espalhamento de fônons devem ser levados em conta para o transporte de calor em um transiente rápido. Portanto, o segundo desafio que a microescala oferece é no tempo, em relação às teorias convencionais da macroescala (Tzou, 2015).

1.1.2. Uso de modelos de transferência de calor para pequenas escalas

Nas últimas décadas, diminuindo o tamanho dos dispositivos eletrônicos para valores menores que o caminho livre médio dos fônons dos materiais, a simulação em transferência de calor da micro e nanoescala têm ganhado bastante atenção. Por outro lado, resultados obtidos através das equações da mecânica clássica do contínuo desviam-se gradualmente dos resultados experimentais, à medida que o tamanho do dispositivo é diminuído pelas razões explicadas no parágrafo anterior. Conseqüentemente, inúmeras investigações atômicas têm sido desenvolvidas para simular a condução e convecção de transferência de calor em nanoescala. (Ghazanfarian e Abbassi, 2012).

Um dispositivo eletrônico com dimensão característica da mesma ordem que o livre caminho médio merece atenção especial, já que os efeitos da interação entre os transportadores de calor, como por exemplo, a interação entre elétrons e fônons ou o espalhamento de fônons, podem aumentar muito a transferência de calor em pequenos tempos. Este aumento da transferência de calor cresce a zona de calor afetada e promove o aumento de temperatura na região, que por ventura leva a uma falha precoce dos dispositivos

se não previamente prevenidos (Tzou, 2015). Os dois desafios apresentados pela microescala, no espaço e no tempo, em relação à macroescala devem ser acomodados e investigados simultaneamente no mesmo quadro, não podendo então ser separados.

Foram desenvolvidos e estudados outros modelos para obterem-se resultados com significado físico na transferência de calor em pequenas escalas. Serão descritos no Capítulo II o MIEF, o MEF, o MHCC, MBD e o MCDR. Os dois primeiros modelos enfatizam os efeitos das pequenas escalas no espaço, enquanto que o terceiro modelo enfatiza os efeitos no tempo. O modelo balístico difusivo assume que quando o comprimento característico é da ordem ou menor que o livre caminho médio, o transporte de calor se dá em parte por maneira difusiva e em parte balística. O modelo de duplo retardo acomoda e investiga simultaneamente os efeitos no tempo e no espaço.

Para ter uma ideia da importância dos modelos de condução que não seguem a Lei de não-Fourier e das inúmeras pesquisas desenvolvidas sobre o tema, a Tabela 1.3 apresenta dados de uma revisão sobre o comportamento de defasagem nos modelos de condução de calor da macro para a nanoescala, publicada por Ghazanfarian *et al.* (2015). A Tabela 1.3 apresenta uma estatística de publicações acerca do tema contendo 404 artigos e está dividido em três seções. A Seção I apresenta a quantidade de publicações em livros e artigos de revisão acerca do tema. A Seção II apresenta a quantidade de publicações sobre a fundamentação teórica e métodos de solução acerca de: Modelos não-Fourier, Formulação e Condições de Contorno, Termodinâmica, Valores dos Tempos de Retardo, Métodos Analíticos e por fim, Métodos Numéricos. A Seção III apresenta a quantidade de artigos envolvendo determinadas aplicações, sendo estas: Bio-Engenharia (BE), Aquecimento a laser de alta velocidade (AL), Aplicações em escoamento (FF), Transferência de Calor em micro e nanoescala (TCMN), Materiais de múltiplas camadas (MMC), teoria da termoeslasticidade (TT), Transferência de Calor em falhas de materiais (TCRM), Modelo de Duplo Retardo de difusão (MDRD) e outras aplicações.

Tabela 1.3: Tabela apresentada por Ghazanfarian *et al.* (2015) sobre a distribuição de 404 publicações envolvendo o Modelo de Duplo Retardo em Livros e Artigos de Revisão, acerca da Fundamentação Teórica e Métodos de Solução Utilizados e suas devidas aplicações.

Fonte: Adaptado de Ghazanfarian *et al.* (2015)

Seção I: Livros e Artigos de Revisão								
Livros			Artigos de Revisão					
9 (2.2%)			5 (1.2%)					
Seção II: Fundamentação Teórica e Métodos de Solução								
Modelos Não Fourier	Formulação e Condições de Contorno	Termodinâmica	Valores dos tempos de retardo	Métodos Analíticos	Métodos Numéricos			
53 (13.1%)	33 (8.1%)	16 (3.9%)	9 (2.2%)	41 (9.9%)	29 (7.1%)			
Seção III: Aplicações								
BE	AL	FF	TCMN	MMC	TT	TCRM	MDRD	Outras
25 (6.2%)	27 (6.7%)	10 (2.5%)	40 (10.1%)	24 (5.9%)	47 (11.6%)	10 (2.5%)	6 (1.5%)	22 (5.4%)

Na Tabela 1.2, feita por Ghazanfarian (2015) e adaptada neste trabalho, pode-se observar que existem diversas áreas envolvendo trabalhos que tratam do Modelo de Duplo Retardo, algumas das publicações envolvem mais de um dos temas, sendo, portanto, contados mais de uma vez nas estatísticas. Como dito anteriormente, o número de artigos desta tabela é 404, porém o número de citações é 299, mostrando assim a interdisciplinaridade dos modelos de condução não-Fourier. Pode-se observar um grande número de artigos em aplicações de TCMN (onde se encaixa o modelo de Duplo Retardo), bem como em TT, ficando evidente a significância da quantidade de pesquisas nestas áreas.

O modelo de condução de calor de duplo retardo vem sendo utilizado em diversos estudos de transferência de calor em pequenas escalas, envolvendo problemas multidimensionais em dispositivos microeletrônicos (Ghazanfarian e Abbassi, (2009)). Através de uma busca extensiva por referências bibliográficas em periódicos, no *Google*

Scholar e na plataforma do Periódicos da Capes, envolvendo conjuntos combinados de palavras-chave (*dual phase lagging model*) foram encontrados trabalhos recentes envolvendo problemas de condução de calor multidimensionais através do modelo de condução de duplo retardo, que serviram como motivação para esta tese de doutorado, tais como Wu, *et al.* 2015; Saghatchi, 2015, Ghazanfarian, 2015, Ghazanfarian *et al.* 2015; Nasri *et al.* 2015; Moghaddam *et al.* 2014; Lee *et al.* 2014; Majchrzak e Mochnacki, 2014; Lam, 2013; Ghazanfarian, e Abbassi, 2012; Ghazanfarian e Shomali, 2012; Yang, 2014, entre outros. Muitas destas pesquisas envolvem o estudo da transferência de calor em transistores, peças de importância relevante para o funcionamento de dispositivos microeletrônicos e uma das fontes de dissipação de energia dos mesmos. Outras trabalhos, tais como Sonwu, *et al.* 2015, Majchrzak e Mochnacki, 2014, Yang, 2014, Lee *et al.* 2014, Mochnacki e Paruch, 2013, fizeram uso dos problemas inversos para estimação de parâmetros como também da fonte de calor e a análise dos coeficientes de sensibilidade em problemas envolvendo o MCDR.

A possibilidade de estudar os efeitos do tempo e do espaço em um único modelo de condução de calor, juntamente com a quantidade de trabalhos e pesquisas que vem sendo realizadas com o modelo de condução de duplo retardo, serviram de motivação para estudar a transferência de calor em dispositivos eletrônicos, tais como transistores, para que através do uso de técnicas de otimização e de problemas inversos realizar um incentivo de melhorias na direção de prolongar a vida útil destes dispositivos, diminuindo a temperatura das zonas mais termicamente afetadas. Sendo, portanto, a principal contribuição desta tese de doutorado é a estimativa pela técnica de problemas inversos através de uma abordagem Bayesiana de parâmetros inerentes ao modelo de duplo retardo, no caso os tempos de relaxação devido ao vetor fluxo de calor e devido ao gradiente de temperatura, que são propriedades intrínsecas dos materiais na micro e nanoescala.

1.2. Estrutura da Tese

Neste Capítulo I foi apresentada a motivação deste trabalho, algumas informações sobre mecanismos de transporte de calor em pequenas escalas e modelos e por fim, os campos de estudo do modelo de duplo retardo.

No Capítulo II são apresentados uma fundamentação teórica, modelos de condução de calor para macro e microescala e uma revisão bibliográfica sobre o modelo de condução de calor de Duplo Retardo.

No Capítulo III encontra-se a justificativa deste trabalho e seus objetivos: geral e específicos.

No Capítulo IV encontram-se conceitos fundamentais sobre os problemas inversos.

No Capítulo V encontra-se a descrição dos problemas físicos estudados, as formulações matemáticas dos problemas bem como, as formulações dos problemas diretos associados.

No capítulo VI são apresentados os resultados das soluções numéricas dos problemas diretos e a verificação das soluções.

No Capítulo VII são apresentados a solução por Problemas Inversos, contendo a análise de coeficientes de sensibilidade, resultados do projeto ótimo de experimento, como também os resultados de estimativa de parâmetros, cuja solução é obtida por Inferência Bayesiana através do método MCMC, utilizando o algoritmo de Metropolis-Hastings com medidas simuladas.

No Capítulo VIII são apresentadas as conclusões do presente trabalho e sugestões para trabalhos futuros neste campo de pesquisa.

Ao final estão as referências bibliográficas utilizadas nesta tese de doutorado e logo após os Apêndices de I ao IV.

CAPÍTULO II

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DE MODELOS DE CONDUÇÃO DE CALOR

Este capítulo destina-se a apresentar uma fundamentação teórica para modelos de condução de calor. Devido à grande variedade de modelos que foram surgindo, serão descritos aqui apenas os principais, que também podem ser encontrados em referências importantes, tais como (Tzou, 2015) e Chen (2001).

2.1. Lei de Fourier de Condução de Calor

O modelo parabólico de condução de calor (MPCC), também conhecido como modelo clássico de difusão de Fourier, está baseado na relação constitutiva de Fourier, ou simplesmente Lei de Fourier, que descreve a relação entre o fluxo de calor por condução e o gradiente de temperatura na macroescala, dada por:

$$\mathbf{q}(\mathbf{r},t) = -k\nabla T(\mathbf{r},t) \quad (2.1)$$

Onde \mathbf{r} o representa o vetor posição, t representa o tempo, \mathbf{q} o vetor fluxo de calor e k representa a condutividade térmica, que é uma propriedade intrínseca do material. A Eq. (2.1) é adequada para sólidos isotrópicos e homogêneos.

A Lei de Fourier foi a primeira relação constitutiva proposta, que é uma relação entre o fluxo de calor por condução e o gradiente de temperatura, onde o primeiro é diretamente proporcional ao segundo e que ocorrem no mesmo instante de tempo. O gradiente de temperatura é um vetor normal às isotermas e o fluxo de calor representa a transferência de calor por unidade de tempo, por unidade de área de cada superfície isotérmica na direção da temperatura decrescente. Recebe este nome graças ao físico e matemático Joseph Fourier, que a utilizou em seu trabalho analítico sobre condução de calor. Esta relação é baseada em observações experimentais sendo, portanto, uma lei empírica, que considera que a velocidade com que a propagação do calor ocorre no meio é infinita (Incropera, 2008).

Considerando um material isotrópico, fazendo um balanço de energia em um volume dV que recebe um fluxo de calor \mathbf{q} (Eq. (2.1)) e aplicando a Primeira Lei da Termodinâmica dada por:

$$-\nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{r}, t) + g(\mathbf{r}, t) = \rho c_p \frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (2.2)$$

obtemos a equação parabólica de condução de calor representada pela Equação (2.3) para o caso de propriedades constantes (Ozisik, 1993; Incropera, 2008; Wang *et al.* 2008) dada por:

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla^2 T + \frac{g}{k} \quad (2.3)$$

onde α , ρ , c_p e g representam a difusividade térmica, a massa específica, calor específico à pressão constante e a geração interna de energia por unidade de volume, respectivamente. A difusividade α representa a capacidade que o material possui de conduzir calor em relação à sua capacidade de armazenar e é obtida através de:

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p} \quad (2.4)$$

Portanto, o significado da difusividade térmica está associado à taxa de variação de temperatura com o tempo.

A Eq. (2.3) é uma equação diferencial parcial, linear, de segunda ordem, não homogênea e de caráter parabólico. A anulação do termo g na Eq. (2.3), quer dizer que a transferência de calor no meio está ocorrendo sem geração interna de energia.

No modelo de Fourier, o que se mede é a temperatura de equilíbrio, sendo válida, portanto a definição de equilíbrio local, ou seja, que existe equilíbrio termodinâmico (Zhang, 2008). Desta maneira, se tratarmos a condução de calor como um problema difusivo, baseado no conceito de equilíbrio local, podemos determinar a temperatura de equilíbrio em todo ponto (Zhang, 2008). O modelo clássico de difusão é amplamente utilizado, de modo

satisfatório, em inúmeros problemas de engenharia na macroescala. A Lei de Fourier sugere que a condução de calor é um fenômeno difusivo, onde a velocidade de propagação do calor é infinita. Sendo assim, uma perturbação térmica em qualquer ponto de um meio sólido será imediatamente detectada em qualquer outro ponto deste meio. Porém, com o avanço da tecnologia, foram surgindo muitas aplicações em pequenas escalas, envolvendo fluxos de calor muito altos e de duração muito curta, onde a aplicação do modelo de Fourier começou a ser questionável, já que para estes casos a hipótese de equilíbrio local não é mais válida.

A velocidade infinita de propagação do calor do modelo de Fourier torna-se um paradoxo, gerando resultados inadequados quando aplicado em problemas que envolvem pequenas escalas. Isto porque, devido à miniaturização das geometrias, as escalas de comprimento dos sistemas micro e nano estão muitas vezes abaixo do livre caminho médio dos transportadores de energia, e quando isto ocorre, é necessário considerar fenômenos tais como as interações entre os transportadores de calor, bem como a defasagem entre o fluxo de calor e o gradiente de temperatura e, não sendo, portanto, a Lei de Fourier, válida.

Neste sentido, com o intuito de eliminar o paradoxo da velocidade de propagação de calor infinita, foram surgindo vários modelos de condução de calor que consideram algum tipo de retardo entre o fluxo de calor e o gradiente de temperatura. Nas próximas seções serão apresentados alguns destes modelos.

2.2. Modelo Hiperbólico de Condução de Calor (MHCC) ou de Cattaneo-Vernotte (CV)

Com o intuito de eliminar o paradoxo da velocidade infinita de propagação de calor, Cattaneo (1948, 1958) e Vernotte (1958) propuseram simultaneamente e independentemente uma nova relação constitutiva de calor, modificando o MPCC. A equação constitutiva do MHCC é dada por: $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t + \tau_q) = -k \nabla T(\mathbf{r}, t)$, que sugere que um gradiente de temperatura estabelecido no ponto \mathbf{r} em um tempo t causa um vetor fluxo de calor em um tempo posterior $t + \tau_q$. Portanto, existe um determinado tempo, τ_q , para o começo do fluxo de calor em \mathbf{r} depois que um gradiente de temperatura é imposto ali. O MHCC caracteriza a combinação da difusão com o comportamento de onda da condução de calor com uma velocidade finita. A expansão em séries de Taylor de primeira ordem da equação constitutiva

deste modelo permite com que todas as quantidades físicas sejam realocadas no mesmo instante de tempo levando a uma nova relação dada por:

$$\mathbf{q}(\mathbf{r},t) + \tau_q \frac{\partial \mathbf{q}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -k \nabla T(\mathbf{r},t) \quad (2.5)$$

onde $\tau_q > 0$ é o tempo de relaxação, que é uma propriedade intrínseca do material. O tempo de relaxação é um parâmetro empírico definido como o intervalo entre duas colisões consecutivas dos transportadores de calor no nível microscópico. Neste caso, o tempo de relaxação representa o tempo necessário para estabelecer o fluxo de calor quando o gradiente de temperatura é imposto (Wang, Zhou e Wei, 2008).

O segundo termo do lado direito da Eq. (2.5) considera os efeitos de um regime transiente muito rápido e assume que o fluxo de calor é resultado do gradiente de temperatura e da taxa de variação do próprio fluxo. Fazendo $\tau_q = 0$ na Eq. (2.5), recaímos na equação constitutiva de condução de calor de Fourier, representada pela Eq. (2.1). Quanto maior a derivada do segundo termo do lado esquerdo da Eq. (2.5), maior é a sua diferença com o modelo clássico de Fourier.

Combinando a Eq. (2.5) com a equação de conservação da energia obtém-se a equação governante do MHCC, ou modelo de única defasagem, dada por (Wang *et al.* 2008):

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\tau_q}{\alpha} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \nabla^2 T + \frac{1}{k} \left[\mathbf{g} + \tau_q \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial t} \right] \quad (2.6)$$

onde as propriedades termofísicas foram tomadas como constantes.

A Eq. (2.6) é uma equação diferencial parcial, linear, de segunda ordem, não homogênea e de caráter hiperbólico. A Eq. 2.6 sem a presença do termo fonte é chamada de equação do telégrafo, onde transferência de calor no meio está ocorrendo sem geração interna de energia.

Sendo uma equação hiperbólica, o modelo de condução de calor de Cattaneo-Vernotte descreve o comportamento de uma onda, neste caso uma onda térmica, onde sua amplitude decai exponencialmente com $\exp\left(-t/\tau_q\right)$. A natureza dos sinais térmicos será

inferior ao comportamento difusivo quando $\frac{\partial T}{\partial t} \gg \frac{T_r}{2\tau_q} \exp\left(-t/\tau_q\right)$, onde T_r é uma temperatura de referência (Wang, Zhou e Wei, 2008). Do contrário, o comportamento de onda se torna mais significativo quando o tempo de relaxação é alto, quando a derivada da temperatura em relação ao tempo é pequena e o tempo em que ocorre o processo é pequeno.

Este modelo descreve a perturbação da propagação de calor como uma onda, onde a difusividade térmica do material aparece como um fator de amortecimento no efeito de propagação de calor. A velocidade desta onda, definida como A , está relacionada com o tempo de relaxação e com a difusividade térmica do material por (Wang e Zhou, 2000; Wang *et al.* 2008):

$$A_r = \sqrt{\frac{\alpha}{\tau_q}} \quad (2.7)$$

Quando a velocidade térmica da onda A se aproxima de infinito, isto implica que $\tau_q \rightarrow 0$, reduzindo a Eq. (2.6) na Eq. (2.3).

Depois de um tempo longo, normalmente de 5 a 10 vezes do valor de τ_q , o equilíbrio termodinâmico local é reestabelecido e a Eq. (2.6) passa a apresentar o mesmo comportamento do modelo de Fourier (Zhang, 2008).

Três fatores contribuem com significância para o segundo termo do lado esquerdo da Eq. (2.6), que é o termo que caracteriza o comportamento de onda da condução de calor: o valor do tempo de relaxação, a taxa de mudança de temperatura e a escala de tempo envolvida (Wang *et al.*, 2008). Portanto, quanto maiores estes termos, maior será o comportamento de onda da temperatura.

Brown *et al.* (1966) realizaram experimentos para verificar a propagação de onda em cristais dielétricos e hélio líquido à temperaturas muito baixas, reportando valores de tempo de relaxação da ordem de 10^{-6} s e difusividade térmica na ordem de $10\text{m}^2/\text{s}$. Em 1969, Peshkov também observou o comportamento de onda utilizando o modelo de Cattaneo-Vernotte para hélio líquido à temperaturas próximas ao zero absoluto.

Preziosi (1989, 1990) fez uso do modelo hiperbólico de condução de calor para problemas que envolviam um curto tempo de resposta, alta taxa de temperatura e de fluxo de calor com temperatura de troca próximas ao zero absoluto.

Kaminski (1990) e Mitra *et al.* (1995) validaram experimentalmente o comportamento de onda da propagação de calor do modelo hiperbólico para areia e carne processada, respectivamente. Contudo, Grabmann (1999) e Herwig (2000) investigaram a transferência de calor em materiais não homogêneos, encontrando controvérsias no que diz respeito ao comportamento de onda nos trabalhos de Kaminski (1990) e Mitra *et al.* (1995). Grabmann (1999) pôde concluir que o modelo de transferência de calor através da Lei de Fourier utilizando areia molhada conduz a resultados satisfatórios, não encontrando, portanto, efeitos do comportamento de onda nos experimentos que conduziram. Herwig (2000) também conduziu um trabalho com o intuito de demonstrar um comportamento clássico de condução através do modelo de Fourier para materiais não homogêneos, comparando seus resultados com os obtidos por Kaminski (1990) e Mitra *et al.* (1995).

O MHCC para meios finitos foi investigado em diversos estudos, tanto analiticamente como numericamente para diversas condições de fronteiras. Suas soluções foram muitas vezes comparadas com aquelas obtidas pelo modelo de condução de Fourier. Algumas dessas pesquisas envolvendo soluções analíticas são as de Chan *et al.* (1971), Taitel (1972), Ozisik e Vick (1984), Gembarovic e Majernik (1988), Kar *et al.* (1992), Tang e Araki (1996), Lewandoska e Malinowski (2006), Moosaie, A. (2008) e soluções numéricas como as de Wiggert (1977), Glass *et al.* (1985), Kar *et al.* (1992) e Chen (1993).

O trabalho de Moosaie, (2008) apresentou uma solução generalizada em termos de séries de Fourier para transferência de calor através de condução hiperbólica para um problema unidimensional com condições iniciais arbitrárias. Sua solução analítica foi obtida pelo método de separação de variáveis, considerando um material isotrópico, condições de contorno isoladas, propriedades térmicas constantes e condições iniciais arbitrárias, funções do espaço. Os resultados mostraram que o tempo para atingir o regime permanente cresce à medida que o tempo de relaxação cresce, já que o tempo de propagação de onda é inversamente proporcional ao tempo de relaxação. Outra conclusão deste trabalho é que a forma da onda de calor é inerente à forma da distribuição inicial de temperatura do meio.

Lewandoska e Malinowski (2006) apresentaram uma solução analítica para a equação da condução de calor em uma placa fina aquecida nos dois lados. O aquecimento da placa foi tratado como uma fonte de interna de calor, enquanto que as extremidades estão isoladas. Os autores estudaram as ondas de calor que são excitadas na vizinhança dos dois

lados das superfícies da placa e concluíram que estas viajam em direções opostas, superpõem-se e refletem-se para trás entre as superfícies.

Mochnecki e Paruch (2013) fizeram uso da solução do problema inverso para estimar o tempo de relaxação do modelo hiperbólico de condução de calor por meio de um algoritmo evolucionário em um problema de aquecimento em um filme fino de metal através de um laser, obtendo estimativas em boa concordância com os valores exatos. O problema direto foi resolvido através da técnica de diferenças finitas.

Hsu e Chu (2004) estimaram uma condição de contorno desconhecida em um problema envolvendo o MHCC em um dispositivo eletrônico através da solução do problema inverso pelo método dos mínimos quadrados. O problema direto foi resolvido através do método de diferenças finitas. Os resultados mostraram que um ponto de medida foi o suficiente para estimar a condição de contorno desconhecida sem erros nas medidas. Quando foram considerados os erros nas medidas, as magnitudes das discrepâncias na condição de contorno foram diretamente proporcionais ao tamanho das medidas dos erros.

Muitos estudos foram realizados para investigar a compatibilidade da equação de CV com a Segunda Lei da Termodinâmica (Taitel (1972); Coleman *et al.* (1982); Jou e Lebon, (1996); Bai e Lavine (1995), Barletta e Zanchini (1997)). Jou e Lebon, (1996) investigaram a produção de entropia através do MHCC, onde seus resultados geraram uma produção de entropia negativa. Coleman *et al.* (1982) sugeriram um novo modelo, modificando o MHCC, mostrando que se a entropia depende do fluxo de calor, então também da energia interna. Sendo assim, derivou expressões para a entropia e para a energia interna que atendem às condições da Segunda Lei da Termodinâmica. Existem ainda diversas controvérsias sobre a utilização do modelo de MHCC quanto à segunda lei da termodinâmica. muitos trabalhos apresentam resultados que indicam através de experimentos que o modelo de MHCC não obedece esta lei e outros, entretanto que afirmam que o modelo obedece a segunda lei da termodinâmica. No tópico 2.5, do MCDR, descreveremos a abordagem utilizada neste trabalho, que mostra a aceitação do modelo de MHCC e MCDR quanto à segunda lei da termodinâmica.

A aplicação do MHCC de calor surgiu, portanto com o intuito de eliminar o paradoxo temporal da Lei de Fourier, sendo que não se torna inadequada onde os problemas envolvendo meios onde o tamanho do livre caminho médio é similar ao comprimento característico, uma vez que considera os efeitos que ocorrem devido a um regime transiente

na ordem de picosegundos. Porém, despreza os efeitos de interação entre transportadores de calor dentro do material, sejam estes fônons e elétrons. Sendo assim, tornou-se necessário o desenvolvimento de outro modelo de condução de calor para a microescala, englobando tantos os efeitos de um transiente rápido quanto às interações que ocorrem dentro do material.

2.3. Modelo de Interação Elétron-Fônon (MIEF)

O modelo de Interação Elétron-Fônon (MIEF), também conhecido como modelo de duas temperaturas, descreve a temperatura transiente do elétron e dos fônons em metais ou semicondutores durante o processo de termalização entre os mesmos. (Battaglia e Maillet, 2011)

Anisimov *et al.* (1974) estudaram o comportamento da temperatura do elétron e da temperatura da estrutura do material, particularmente em metais, durante a exposição a pulsos a laser de curta duração. Neste modelo, o não equilíbrio térmico entre os elétrons e a estrutura é um fenômeno importante na transferência de calor em filmes finos sujeitos a pulsos de laser de curta duração. A energia dos fótons presentes no laser é primeiramente absorvida pelos elétrons. A nuvem de elétrons livres se difunde através do material e aquece sua estrutura através de colisões entre elétrons e fônons. A emissão de elétrons através de uma superfície sujeita a um pulso de laser é devido a dois fenômenos chamados de efeito fotoelétrico e de uma emissão termiônica, que resulta do aquecimento do metal.

Anisimov *et al.* (1974) investigaram a importância de cada um desses mecanismos quando filmes de metais são sujeitos a pulsos de curta duração, onde esta duração é menor que o tempo característico de transferência de energia entre os elétrons e a estrutura do material. Sendo assim, energia transferida pelos elétrons para a estrutura por unidade de volume do metal e o por unidade de tempo é dada por (Kaganov *et al.* (1957) *apud* Anisimov *et al.* (1974)):

$$\Delta E = G(T_e - T_l) \quad (2.8)$$

Onde G é o fator de acoplamento entre elétrons e os fônons e controla a transferência de calor entre elétrons e a estrutura quando filmes finos de metal são aquecidos por pulsos de laser na duração de fentosegundos, já que para este tempo de duração de pulso ainda não há o equilíbrio térmico. O fator de acoplamento é uma característica do material e

geralmente é tido como uma constante. O fator G é dado por Kaganov *et al.* (1957) apud Anisimov *et al.* (1974):

$$G = \frac{\pi^2 m_e n_e c^2}{6\tau_e T_e} \quad (2.9)$$

Na Eq. (2.9), c é a velocidade do som, τ_e é o tempo de relaxação do elétron que é também função da temperatura do elétron T_e , m_e é a massa dos elétrons livres e n_e representa o número de densidade dos elétrons livres por unidade de volume. Esta equação é válida quando as temperaturas do elétron e da estrutura, T_e e T_l , são muito maiores que a temperatura de Debye.

Qiu e Tien (1992) analisaram microscopicamente as interações em um metal devido à radiação de um aquecimento a laser de curta duração e estudaram seus efeitos na resposta térmica do material.

A Figura 2.1 ilustra os mecanismos microestruturais que ocorrem quando um pulso a laser atinge um filme de metal. Elétrons e fônons não são partículas regulares com formas definidas nem possuem posições determinísticas, porém são ilustrados conceitualmente na Fig. 2.1 apenas para descrever suas interações/colisões. Primeiramente, os fótons excitam os elétrons até altos níveis de energia e rapidamente os elétrons termalizam dando origem a uma nuvem de elétrons livres. Em altas temperaturas, esta nuvem de elétrons penetra no metal difusivamente e então aquece sua estrutura através de colisões com os fônons. À temperatura ambiente, o tempo de colisão é na ordem de fentosegundos e devido à grande diferença entre os momenta dos elétrons e fônons, uma grande troca de energia entre os elétrons e fônons requer dezenas de colisões. Por final, o tempo de relaxação térmica é da ordem de picosegundos. Quando o tempo de duração do pulso é muito mais longo que o tempo de relaxação térmica entre elétrons e fônons, os elétrons possuem tempo suficiente para estabelecer um equilíbrio térmico local com a estrutura. Sendo assim, os elétrons e a estrutura possuem a mesma temperatura podendo então ser modelados pelo modelo convencional de Fourier. Quando o tempo do laser é comparado ao tempo de relaxação entre elétrons e fônons, então as interações entre elétrons e fônons se tornam de extrema importância para o processo. Os elétrons são excitados pelo laser fazendo com que ocorra um desequilíbrio térmico em relação à estrutura do material. Isto pode ser modelado basicamente

devido a dois processos: a absorção da energia provida dos fótons pelos elétrons e o aquecimento da estrutura devido às colisões entre elétrons e fônons.

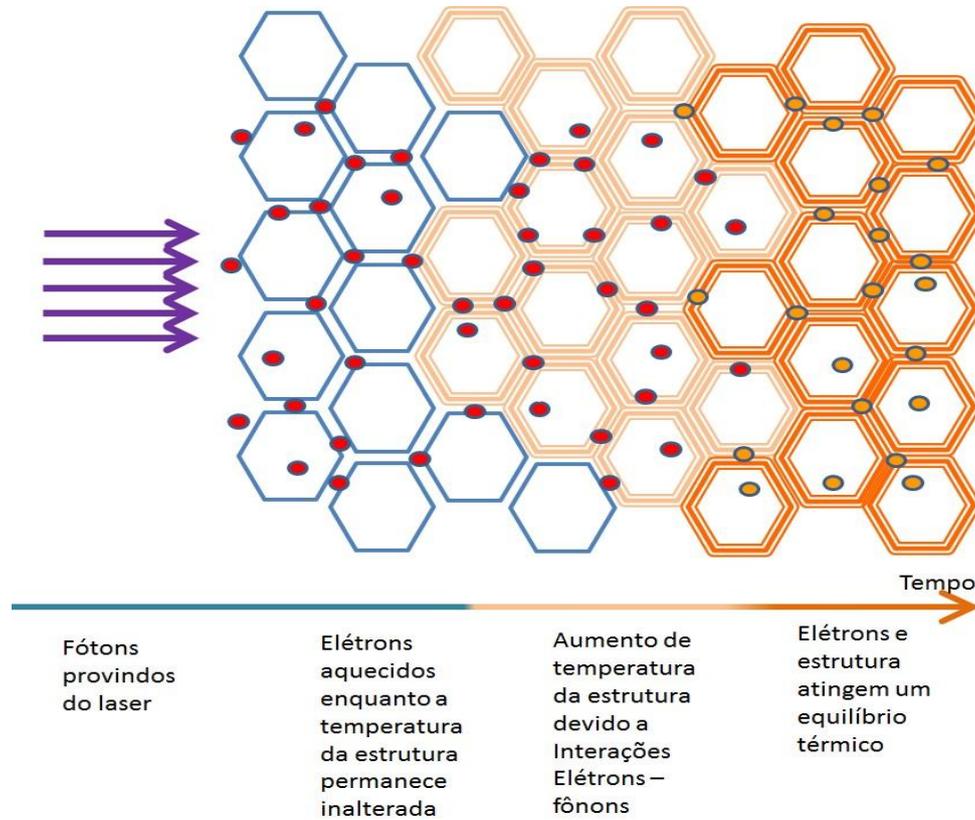


Figura 2.1: Mecanismos internos de interações entre fótons, elétrons e a estrutura do material.

Qiu e Tien (1992, 1993) introduziram o modelo hiperbólico de dois passos (Eqs. (2.10-2.11)) que descreve a transferência de calor no aquecimento de metais através de pulsos de curta duração, considerando que a interação elétron-fônon é o processo de espalhamento dominante para os elétrons, sendo a interação elétron-elétron desprezada. O processo de condução através dos fônons também é desprezado e no estado de não equilíbrio os fônons e os elétrons apresentam temperaturas diferentes, sendo, portanto, T_e e T_l .

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q} - G(T_e - T_l) + g \quad (2.10)$$

$$C_l(T_l) \frac{\partial T_l}{\partial t} = G(T_e - T_l) \quad (2.11)$$

onde,

$$\mathbf{q}(\mathbf{r},t) + \tau_q \frac{\partial \mathbf{q}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + k \nabla T_e = 0 \quad (2.12)$$

onde C_e e C_l são as capacidades térmicas volumétricas dos elétrons e da estrutura do metal respectivamente e g representa o termo fonte provindo da radiação do laser.

Quando a duração do pulso é maior que o tempo de relaxação do elétron, recaímos sob o modelo parabólico de dois passos dado por (Anisimov *et al.* (1974); Qiu e Tien, 1993; Orlande *et al.* 1995):

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T_e) - G(T_e - T_l) + g \quad (2.13)$$

$$C_l(T_l) \frac{\partial T_l}{\partial t} = G(T_e - T_l) \quad (2.14)$$

Combinando as Eqs. (2.13) e (2.14) a fim de eliminar a temperatura do elétron T_e , assumindo as propriedades termofísicas constantes e desprezando o termo fonte, obtemos:

$$\frac{1}{A_T} \frac{\partial^2 T_l}{\partial t^2} + \frac{1}{\alpha_T} \frac{\partial T_l}{\partial t} - \frac{\alpha_e}{A_T^2} \frac{\partial (\nabla^2 T_l)}{\partial t} = \nabla^2 T_l \quad (2.15)$$

De maneira análoga, combinando as Eqs. (2.13) e (2.14) a fim de eliminar a temperatura da T_l assumindo as propriedades termofísicas constantes, obtemos:

$$\frac{1}{A_T} \frac{\partial^2 T_e}{\partial t^2} + \frac{1}{\alpha_T} \frac{\partial T_e}{\partial t} - \frac{\alpha_e}{A_T^2} \frac{\partial (\nabla^2 T_e)}{\partial t} = \nabla^2 T_e \quad (2.16)$$

Onde, A_T , α_T , α_e são respectivamente:

$$A_T = \sqrt{\frac{kG}{C_e C_l}} \quad \alpha_T = \frac{k}{C_e + C_l} \quad \alpha_e = \frac{k}{C_e} \quad (2.17)$$

Sabemos que tempo de relaxação é dado por:

$$\tau = \frac{\alpha_T}{A_T^2} \quad (2.18)$$

Combinando as equações (2.17) e (2.18) e utilizando o fato que $C_e \ll C_l$, isto nos leva a:

$$\tau = \frac{C_e}{G} \quad (2.19)$$

Mudanças na temperatura de semicondutores ou metais levam às mudanças nas refletividades das suas superfícies e a esse efeito dá-se o nome de termo-reflectância. Quando um material tem uma mudança de temperatura ΔT o seu coeficiente de reflexão muda para um valor ΔR . Expandindo ΔR , tem-se (Clayes, 1993):

$$\Delta R = a\Delta T + b(\Delta T)^2 + \dots \quad (2.20)$$

onde a e b são coeficientes de um polinômio.

Para pequenas mudanças na temperatura tem-se:

$$\Delta R = a\Delta T \quad (2.21)$$

Brorson *et al.*, 1990; Elsayed-Ali, 1991, e Qiu *et al.* 1994 através de medições experimentais da variação da refletividade, pela técnica de termo-reflectância transiente, obtiveram variação da temperatura do elétron para filmes metálicos.

Um experimento conduzido pela técnica da termo-reflectância transiente consiste em aquecer a amostra com um pulso de laser enquanto um feixe de prova de laser (com intensidade bem menor) é focado na área aquecida. A intensidade refletida do feixe de prova é captada por um fotodiodo. Como a intensidade do feixe de prova varia linearmente com a temperatura, o sinal captado pelo fotodiodo durante o experimento é proporcional à variação da temperatura transiente da superfície da amostra. De acordo com, Brorson *et al.*, 1990, a refletividade da amostra muda com variações nas temperaturas do elétron e da estrutura, entretanto numa escala de tempo da ordem de picosegundos os efeitos das variações de temperatura da estrutura podem ser desprezados já que o aumento da temperatura do elétron é muito maior durante este período. Um pós-processamento do sinal, calibrado experimentalmente para este fim, permite normalizar a resposta da amostra ao impulso. No

entanto, para obter a variação da temperatura dos elétrons primeiramente é preciso obter o coeficiente a da equação 2.21 através de uma calibração do experimento. Esta calibração é feita sendo realizado o experimento até um tempo maior onde os elétrons e a estrutura do material entram em equilíbrio térmico alcançando a temperatura de equilíbrio. Através de um balanço de energia na amostra e considerando que a capacidade térmica dos elétrons pode ser desprezada, obtém-se a variação da temperatura de equilíbrio, que uma vez substituída na Eq. 2.18 fornece o coeficiente a , que é função de propriedades intrínsecas do material, da espessura da amostra e também do comprimento de onda do pulso. A partir do conhecimento do coeficiente a , e da variação da refletividade da superfície numa escala de tempo da ordem de picosegundos é obtém-se a temperatura dos elétrons. Este experimento está bem descrito em Brorson *et al.* 1990; Elsayed-Ali, 1991, Qiu *et al.*, 1994.

Os dados medidos são obtidos na forma da variação normalizada da refletividade na superfície de um filme, que é igual à variação normalizada da temperatura dos elétrons, dada por:

$$\frac{\Delta R(t)}{(\Delta R)_{\max}} = \frac{\Delta T_e(t)}{(\Delta T_e)_{\max}} \quad (2.22)$$

onde $\Delta R(t)$ e $\Delta T_e(t)$ é a variação da refletividade e da temperatura no tempo respectivamente, enquanto $(\Delta R)_{\max}$ e $(\Delta T_e)_{\max}$ é a variação do pico de refletividade e de temperatura respectivamente.

Uma vez que o lado esquerdo da Eq. (2.22) pode ser obtido experimentalmente, o lado direito pode ser obtido através da solução do modelo de interação elétron-fônon. Quando o tempo de termalização entre os fônons e os elétrons acaba, o experimento de termo-refletância transiente só mede a temperatura da rede cristalina do material. Desta maneira, a utilização do modelo de interação elétron-fônon só tem sentido físico até o final do tempo de termalização, já que o mesmo se degenera em um modelo de difusão quando o tempo do experimento for maior que o tempo característico. (Battaglia e Maillet, 2011).

2.4. Modelo de Espalhamento de Fônons (MEF)

Antes de apresentar o MEF, se faz necessário uma introdução dos principais mecanismos de espalhamentos de fônons. Em semicondutores, dielétricos e isolantes o

transporte de calor é governado pelo espalhamento de fônons através da fronteira do sistema, através de impurezas (como por exemplo, um semiconductor dopado) ou ainda através de processos resistivos. A Figura 2.2 apresenta os diversos tipos de mecanismos de espalhamentos de fônons, bem como os tipos de processos, resistivos e não resistivos.

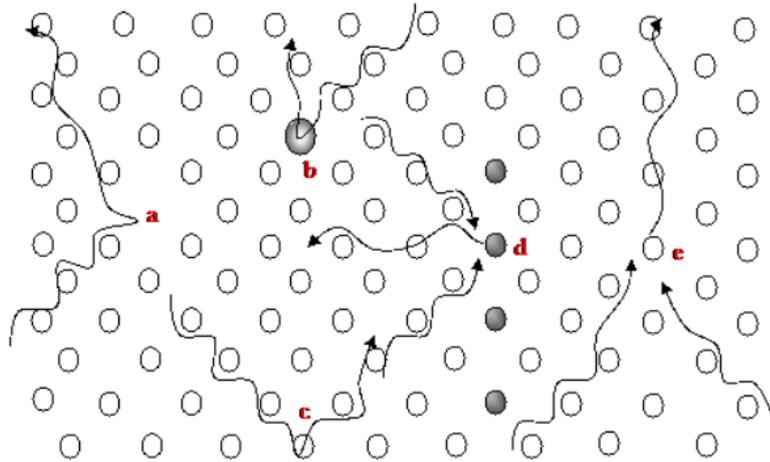


Figura 2.2: Representação das interações dos fônons e mecanismos de espalhamentos

Fonte: Anderson (2008)

Na Figura 2.2 a representação do processo “a” indica a interação de um fônons com o vazio da estrutura do material, a representação “b” indica a interação com um defeito/impureza presente no material; a representação “c” indica a interação com uma fronteira. Os processos de espalhamentos são indicados na Figura 2.2 pelas representações “d” e “e”, onde o processo “d” indica um processo resistivo no qual há perda de momento e, portanto, a direção do fluxo de energia muda sendo refletido por um plano vertical de átomos, enquanto o processo “e” representa os processos normais onde dois fônons colidem formando um terceiro fônon que viaja na mesma direção.

Supõe-se que os processos internos de espalhamentos de fônons de uma amostra são independentes. Pela regra de Matthiessen temos que o tempo de relaxação resultante é dado pelas contribuições dos tempos de relaxação devido aos processos e mecanismos internos. Portanto, tem-se que a taxa de espalhamento resultante é dado por $1/\tau = 1/\tau_B + 1/\tau_I + 1/\tau_R$, onde, τ_B, τ_I, τ_R referem-se respectivamente aos tempos de relaxação devido a interações com as fronteiras, com impurezas e a processos resistivos. Os dois primeiros representam interações de um processo não resistivo, ou processo normal, cujo

tempo de relaxação é designado aqui por τ_N . Na ausência de processos não resistivos, a condutividade térmica de um cristal isolante é infinita (Ashcroft e Mermin, 1976). Os fônons podem ser, portanto, criados ou destruídos, podem conservar ou não seu momentum. Contudo, devem obedecer à primeira lei da termodinâmica.

O modelo de espalhamento de fônons descreve a transferência de calor através das colisões e espalhamento exclusivamente de fônons, não havendo, contribuição de condução de calor devido à nuvem de elétrons. O MEF foi desenvolvido por Guyer e Krumhansl (1966) que resolveram a equação linearizada de Boltzmann para um campo puro de fônons em cristais dielétricos, cuja equação constitutiva é representada por:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{c^2 c_p \nabla T}{3} + \frac{1}{\tau_R} \mathbf{q} = \frac{\tau_N c^2}{5} [\nabla^2 \mathbf{q} + 2\nabla(\nabla \cdot \mathbf{q})] \quad (2.23)$$

onde c é a velocidade do som, τ_R refere-se ao tempo de relaxação devido ao momentum não conservativo de fônons (*umklapp process*) onde neste caso o momentum ocorreu pelo espalhamento de elétrons. τ_N é o tempo de relaxação devido ao momentum conservado pelo sistema de fônons.

Combinando a Eq. (2.23) com a equação da conservação da energia e eliminando o vetor fluxo de calor tem-se a equação de transferência de calor através do modelo de difusão de fônons, representada por.

$$\nabla^2 T + \frac{9\tau_N}{5} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla^2 T) = \frac{3}{\tau_R c^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{3}{c^2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \quad (2.24)$$

A equação acima aparece na propagação do segundo som em cristais e foi derivada por Joseph e Preziosi (1989), estabelecendo uma relação com o fluxo do tipo Jeffreys. (Tzou, 2015). As equações do modelo de interação fônon-elétron e do modelo de espalhamento de fônons apesar de terem a mesma raiz, isto é, serem derivadas a partir da equação de transporte de Boltzmann linearizada, apresentam diferentes tipos de acoplamento.

Porém, muito embora representem diferentes formas de acoplamento, nota-se que a Eq. (2.24), que descreve o transporte de calor por colisões entre fônons possui exatamente o mesmo formato das Eq. (2.15 e 2.16) do MIEF.

A forma universal das Eqs (2.15; 2.16 e 2.24), descrevendo o transporte de microescalas em vários meios estimulou o desenvolvimento do conceito generalizado do comportamento de defasagem para um processo transiente rápido de transporte de calor em pequenas escalas por Tzou (1996) que será descrito no tópico a seguir.

2.5. Modelo de Condução de Duplo Retardo (MCDR)

Como visto na seção 2.2, muitos estudos mostraram que a relação constitutiva de MHCC só leva em conta os efeitos do transiente rápido e não as interações micro estruturais (Wang, *et al.*, 2008). Estes dois efeitos são levados em conta pelo MCDR. Apesar da promessa que o MHCC ofereceu em representar a transferência de calor em pequenas escalas, discrepância entre as previsões teóricas e resultados experimentais (Herwig e Becket, 2000), tornaram este modelo de onda térmica aberto para debate (Shen e Zhang, 2008).

Após o surgimento do MIEF (Qiu e Tien, 1993) e do MEF (Joseph e Preziosi, 1989; Guyer e Krumhansl, 1966), Tzou (1996) propôs o MCDR, já que estes dois modelos ajudaram a clarear o mecanismo de transição de não equilíbrio termodinâmico e de troca de energia em nível microscópico (Shen e Zhang, 2008). O MIEF e o MEF foram desenvolvidos examinando a energia transferida envolvida com uma taxa alta de aquecimento na qual existe um transitório desequilíbrio termodinâmico (Xu e Wang, 2005) e são aplicados a um dado problema dependendo de quais transportadores de calor predominam no material onde a transferência de calor ocorre.

O conceito do MCDR pode ser representado matematicamente por:

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t + \tau_q) = -k \nabla T(\mathbf{r}, t + \tau_T) \quad (2.25)$$

onde, de acordo com esta relação, o gradiente de temperatura no ponto \mathbf{r} do material no tempo $t + \tau_T$ corresponde a um vetor de fluxo de calor no ponto \mathbf{r} no tempo $t + \tau_q$, sendo τ_T o tempo de retardo do gradiente de temperatura devido às interações micro estruturais (Tzou, 1996; Tzou, 1997) e τ_q é o tempo de relaxação devido aos efeitos de inércia térmica do

transiente rápido, sendo chamado de tempo de retardo do fluxo de calor. Os tempos de retardo τ_q e τ_T são propriedades térmicas intrínsecas do material (Tzou, 1996, 1997).

Expandindo a Eq. (2.25) através das séries de Taylor e mantendo apenas os termos de primeira ordem, obtém-se a equação constitutiva do modelo de duplo retardo válida para o ponto \mathbf{r} e tempo t .

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) + \tau_q \frac{\partial \mathbf{q}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \cong -k \left(\nabla T(\mathbf{r}, t) + \tau_T \frac{\partial (\nabla T(\mathbf{r}, t))}{\partial t} \right) \quad (2.26)$$

A equação constitutiva do MCDR permite que tanto o gradiente de temperatura ou o fluxo de calor possam ser causa ou efeito um do outro, dependendo dos tempos de retardo do material. Para materiais onde o tempo de retardo do fluxo de calor é maior que o tempo de retardo do gradiente de temperatura, $\tau_q > \tau_T$, temos que o fluxo de calor é induzido pelo gradiente de temperatura, sendo, portanto efeito e causa respectivamente. Para materiais onde tempo de retardo do gradiente de temperatura é maior que o tempo de relaxação do transiente rápido, $\tau_q < \tau_T$, temos que o gradiente de temperatura estabelecido no material é resultado do fluxo de calor, sendo, portanto efeito e causa respectivamente. A relação (2.26) também é conhecida matematicamente como equação constitutiva do tipo Jeffreys.

A Figura 2.3 ilustra esquematicamente esta condição de causa e efeito em relação aos tempos τ_q e τ_T .

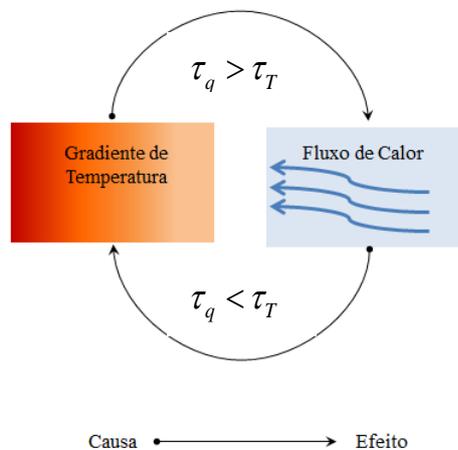


Figura 2.3: Diagrama representativo de causa (círculo) e efeito (seta) com relação ao Gradiente de Temperatura e o Fluxo de Calor no Modelo de Condução de Duplo Retardo.

Tomando o divergente de Eq. (2.26) e acoplando à equação da conservação de energia, considerando todas as propriedades termofísicas do material constantes, obtemos a seguinte equação de condução de calor do modelo de duplo retardo:

$$\nabla^2 T + \tau_T \frac{\partial}{\partial t} (\nabla^2 T) + \frac{1}{k} \left(g + \tau_q \frac{\partial g}{\partial t} \right) = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\tau_q}{\alpha} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \quad (2.27)$$

Analisando os termos da Eq. (2.27), tem-se que o primeiro termo do lado esquerdo representa o Laplaciano, o segundo termo do lado esquerdo é a derivada mista, o terceiro termo é a fonte de calor e o quarto termo representa a fonte aparente de calor. Do lado direito da equação leva em conta o amortecimento das onda de calor e o segundo termo representa o comportamento de onda da condução de calor. A Eq. (2.28) é parabólica quando $\tau_q < \tau_T$ (Wang e Zhou, 2000,2001) e para este caso, apesar do termo de onda existir na equação, a derivada mista destrói completamente o efeito de onda. Neste caso, a equação prediz um comportamento de “não-onda” que difere daquele apresentado pelo modelo de Fourier. Entretanto, quando $\tau_q > \tau_T$ predomina o comportamento de onda dos sinais térmicos. (Wang *et al.* 2008). Na Eq. (2.27) τ_q induz a fonte de calor aparente que é a base da física para o fenômeno de ressonância explorado por Tzou na teoria da condução de calor (Tzou, 2015).

Fazendo $\tau_T = \tau_q = 0$ na Eq.(2.27), recaímos sob a equação constitutiva de condução de calor de Fourier representada pela Eq. (2.4) já que desta maneira a resposta entre o gradiente de temperatura e o fluxo de calor é instantânea. Para os casos onde $\tau_T = \tau_q \neq 0$ também recaímos sob a relação de Fourier, já que a resposta entre os dois termos também é instantânea. Se fizermos $\tau_T = 0$ na Eq. (2.27), recaímos sob a equação constitutiva de condução de calor de MHCC, onde o fluxo de calor é resultado do gradiente de temperatura.

A formulação da equação do MCDR em função do fluxo de calor é obtida primeiramente tomando o gradiente da equação da conservação da energia e depois substituindo a derivada do gradiente de temperatura em relação ao tempo na (Eq. 2.26), obtendo

$$\mathbf{q} + \tau_q \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -k(\nabla T) + \alpha \tau_T (\nabla(\nabla \mathbf{q}) - \nabla g) \quad (2.28)$$

Derivando a Eq. (2.28) com respeito ao tempo e substituindo na equação da conservação da energia, obtém-se finalmente a equação do MCDR para o fluxo de calor, dada por:

$$\nabla(\nabla \mathbf{q}) + \tau_T \frac{\partial}{\partial t} [\nabla(\nabla \mathbf{q})] - \left[\nabla g + \tau_q \frac{\partial(\nabla g)}{\partial t} \right] = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\tau_q}{\alpha} \frac{\partial^2 \mathbf{q}}{\partial t^2} \quad (2.29)$$

Considerando que não há geração de energia interna na Eq. (2.27) e comparando com as Eqs. (2.15) e (2.16) percebe-se que todas possuem o mesmo formato. Realizando uma correspondência entre seus coeficientes, conseguimos representar as propriedades macroscópicas como:

$$\alpha = \alpha_e = \frac{k}{C_e C_l} \quad (2.30a)$$

$$\tau_T = \frac{\alpha_e}{A_T^2} = \frac{C_l}{G} \quad (2.30b)$$

$$\tau_q = \frac{\alpha_e}{A_T^2} = \frac{C_l C_e}{G(C_l + C_e)} \quad (2.30c)$$

Da mesma maneira podemos realizar uma correspondência entre os coeficientes da Eq. (2.27) e a Eq. (2.24) (considerando que na Eq. (2.27) o termo de geração de energia interna é nulo):

$$\alpha = \frac{\tau_R c^2}{3} \quad (2.31a)$$

$$\tau_T = \frac{9\tau_N}{5} \quad (2.31b)$$

$$\tau_q = \tau_R \quad (2.31c)$$

Tzou (1996) descreve três características importantes do modelo de condução de duplo retardo:

1. O vetor fluxo de calor e o gradiente de temperatura representam respostas locais dentro do meio condutor e não devem ser confundidas com quantidades globais especificadas nas condições de contorno. A aplicação do fluxo de calor nos contornos não garante que o fluxo de calor preceda o gradiente de temperatura. Sendo assim, o gradiente de temperatura ainda pode preceder o fluxo de calor. O que determina qual dos dois vem primeiro depende de fatores combinados como, por exemplo, a carga térmica, a geometria do material e as suas propriedades térmicas.
2. Existem três tempos característicos envolvidos no modelo de condução de duplo retardo: o instante de tempo $(t + \tau_T)$, no qual o gradiente de temperatura é estabelecido no material; o tempo $(t + \tau_q)$ para o começo do fluxo de calor; e, por fim, o tempo t no qual o transporte de calor acontece.
3. Como já dito anteriormente, os dois tempos de retardo τ_T e τ_q são propriedades intrínsecas do material, como a condutividade térmica e a difusividade térmica.

O MCDR apresenta uma forma matematicamente mais geral onde vários modelos de condução de calor podem ser dados como um caso específico do MCDR, além de permitir que o fluxo de calor ocorra antes do gradiente ou que o caso contrário ocorra. A Tabela 2.1 apresenta a correspondência dos coeficientes do MCDR com os coeficientes dos modelos na macroescala, sendo o modelo de difusão de Fourier e o MHCC (macroscópico no espaço e microscópico no tempo), e com os modelos mais populares usados para descrever o transporte de calor em microescala, sendo o MIEF e o MEF.

Tabela 2.1: Correspondência dos coeficientes do MCDR com demais modelos. (Adaptada de Tzou, 2015).

MCDR	Difusão de Fourier	MHCC	MIEF	MEF
α	α	α	$\frac{k_e}{C_l + C_e}$	$\frac{\tau_R c^2}{3}$
τ_t	0	0	$\frac{C_l}{G}$	$\frac{9\tau_N}{5}$
τ_q	0	τ	$\frac{C_l C_e}{G(C_l + C_e)}$	τ_R

Portanto, o modelo de duplo retardo é apontado por conseguir construir uma ponte suave entre as abordagens microscópica e macroscópica, cobrindo uma grande faixa de modelos de condução de calor, podendo ser reduzido ao modelo clássico de difusão, ao modelo de onda térmica, ao modelo de interação entre fônons e elétrons para metais, ao modelo de difusão de fônons para isolantes, semicondutores e filmes dielétricos (Shen e Zhang, 2008). A Figura 2.4 ilustra a “ponte” que o MCDR através das abordagens microscópica e macroscópica cobrindo vários modelos.

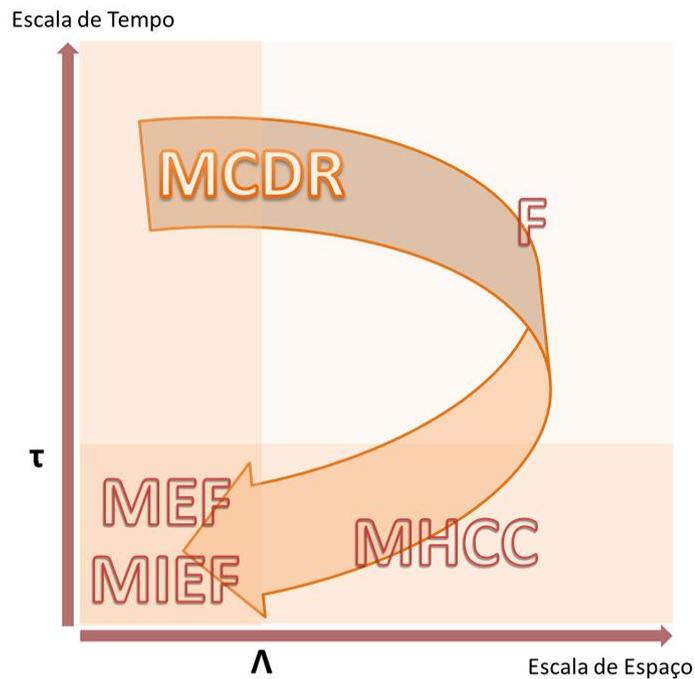


Figura 2.4: Ilustração da “ponte” que o MCDR através das abordagens microscópica e macroscópica cobrindo vários modelos

Nem todos os termos da Eq. (2.27) contribuem igualmente na transferência de calor na medida em que o tempo avança. Sendo assim, cada termo da Eq. (2.27) representa um comportamento físico distinto que atua em tempos específicos. Tzou (2015) apresenta uma figura que representa como os tempos característicos das equações do modelo de Fourier, do MHCC e o MCDR que estão dispostos em uma linha de tempo. A Figura 2.4 mostra esta figura adaptada de Tzou (2015).

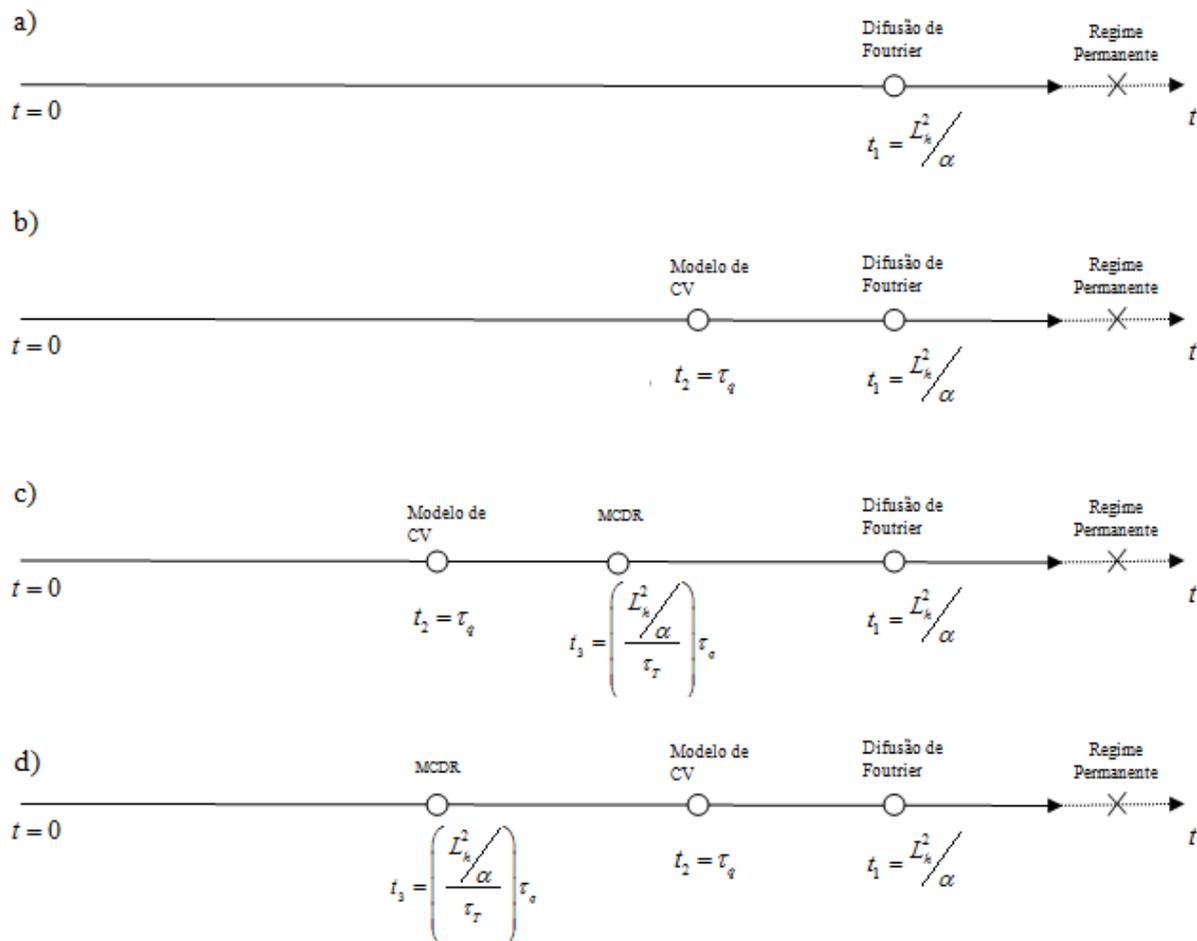


Figura 2.5: Tempos característicos governando a transição do regime permanente, do modelo de Fourier, do modelo de Cattaneo-Vernotte e do MCDR.

Fonte: Figura adaptada de Tzou (2015)

Na Figura 2.5-a se encontra o tempo característico de Fourier, que demarca o início do efeito transiente na difusão de Fourier, onde à medida que o tempo do processo entra na vizinhança de t_1 , o peso do termo de difusão da equação de Fourier é igual ao de condução. Para chegar a este tempo característico os denominadores dos termos de condução e de difusão na Eq. (2.3) devem ser da mesma magnitude. Quando $t \gg t_1$ o termo de difusão é muito menor que o termo de condução e desta maneira o processo entra em regime permanente. Na Figura 2.5-b o segundo tempo do lado esquerdo, t_2 , representa o tempo característico do MHCC. Para chegar a este tempo característico os denominadores dos termos de difusão e de onda na Eq. (2.6) devem ser da mesma ordem de magnitude. Quando $t \gg t_2$ o termo de onda é muito menor que o termo de difusão e desta maneira o processo passa a ser governado pela equação de Fourier. Como o transporte de calor se baseia em

colisões entre os transportadores de calor, o processo de tempo é muitas vezes comparado com o tempo médio livre, ou seja, $t \sim \tau_q$, e é chamado de transiente ultrarápido (Tzou, 2015).

Portanto, entrando nos processos transiente ultrarápido, quando $t < \tau_q$, o efeito do tempo de relaxação devido às interações microestruturais, representado pelo termo da derivada mista da Eq. (2.27) devem ser levados em conta. Para que os efeitos dos dois tempos de relaxação da Eq. (2.27) contribuam igualmente, denominadores dos termos da derivada mista e de onda da Eq. (2.27) devem possuir mesma ordem de magnitude, desta maneira chega-se ao tempo

característico t_3 apresentado na Figura 2.5-c. Quando $\left(\frac{L_h^2/\alpha}{\tau_T}\right) > 1$ e $t_3 > \tau_q$, neste caso o efeito

de τ_T acontecerá antes que o efeito de τ_q do MHCC, como mostra a Figura 2.5-c. Quando

$\left(\frac{L_h^2/\alpha}{\tau_T}\right) < 1$ e $t_3 < \tau_q$, neste caso o efeito de τ_q acontecerá antes que o efeito de τ_T do MHCC,

como mostra a Figura 2.5-d.

Segundo Tzou (1997) e Wu e Wang (2005) *apud* Wang *et al* 2008, tanto o MHCC quando o MCDR mostraram-se serem aceitos pela segunda lei da termodinâmica extensiva irreversível e pelo transporte de Boltzmann. Em seu livro, Tzou (2015) dedica um capítulo à demonstração da compatibilidade do MCDR no contexto da termodinâmica irreversível extensiva, assegurando uma definição da taxa de produção de entropia como sendo positiva.

A termodinâmica irreversível extensiva trata do contexto clássico expandido para descrever estados de não equilíbrio e de transição irreversível da termodinâmica em um processo transiente rápido (Jou *et al*, 1988, 2008, Tzou, 2003). Sendo assim, na termodinâmica irreversível extensiva a hipótese do processo quase estacionário é removida para refletir a natureza da irreversibilidade nas transições termodinâmicas.

Tzou (2015) exhibe um caso especial onde ambos MHCC e MCDR são aceitos dentro da segunda lei da termodinâmica, garantindo uma geração de entropia positiva. Para tanto supõe primeiramente que os estados de não equilíbrio e a irreversibilidade descrevendo o comportamento de onda não se desviam muito do estado de equilíbrio. Para refletir a natureza da irreversibilidade nas transições termodinâmicas, é necessário introduzir outras variáveis de estado além da energia específica interna e o volume específico. No caso do

MHCC, apenas o fluxo de calor é introduzido como variável de estado para definir a entropia específica. Para tanto, supõe-se uma curva convexa de entropia que parece resultar da precedência do gradiente de temperatura em respeito ao vetor fluxo de calor. E a condição suficiente, porém necessária, para uma taxa de geração de entropia positiva recai justamente sobre a equação constitutiva do MHCC. Se ao invés de incluir o fluxo de calor como variável de estado para definir a entropia específica, o gradiente de temperatura for incluído, o caso onde $\tau_q < \tau_T$ é que é tratado. Assim, a equação resultante da condição suficiente, porém necessária para garantir um valor positivo definido para a taxa de geração de entropia para este caso quando é combinada com a equação do caso onde o gradiente de temperatura precede o fluxo de calor, recai justamente sobre a equação constitutiva do MCDR.

Al-Nimr e Khadrawi (2004) analisaram o comportamento térmico de um gás confinado em um microcanal horizontal através do MCDR unidimensional investigando os efeitos do número de Knudsen e dos tempos de relaxação com os modelos de Fourier e MHCC. Foi constatado que, ao contrário do MHCC, os desvios entre o modelo de Fourier e o MCDR são significativos quando operados nas mesmas condições.

Basirat *et al.* (2006) estudaram a transferência de calor através do MCDR para problemas unidimensionais com número de Knudsen maiores que 0.1. Também resolveram o problema com o modelo de Fourier e com o MHCC, comparando todos os resultados obtidos com aqueles obtidos pelo modelo balístico difusivo. Os autores observaram que, para números de Knudsen da ordem de 1, o MCDR obtém resultados com mais acurácia do que aqueles obtidos com o MHCC. Quanto menor o número de Knudsen, mais as soluções do MCDR, MHCC e do modelo de Fourier se aproximaram. O trabalho de Basirat *et al.* (2006) também demonstrou que a acurácia dos resultados diminui significativamente perto da região da parede.

Em um estudo muito similar, Khadrawi e Al-Nimr (2007) investigaram a convecção natural em um fluido com transferência de calor unidimensional em um microcanal vertical, utilizando o MCDR, e seus resultados indicaram que os efeitos de relaxação dos tempos do MCDR são significativos na velocidade de deslizamento, porém que não possuem influência no valor de salto temperatura.

Ghazanfarian e Abbassi (2009) estudaram o efeito do espalhamento de fônons num problema unidimensional de condução de calor com o modelo de duplo retardo na

nanoescala. O problema foi analisado em uma placa fina para diferentes números de Knudsen que correspondem a geometrias em nano e micro escala. Com o intuito de prever corretamente o comportamento dos transportadores de calor nos contornos, eles utilizaram condições de contorno envolvendo o salto de temperatura nas fronteiras, assumindo que a temperatura nos contornos é diferente da temperatura na parede, dada por:

$$T_S^* - T_W^* = -d_1 Kn \left(\frac{\partial T^*}{\partial \mathbf{n}^*} \right)_\Omega \quad (2.32)$$

onde T_S^* é a temperatura de salto da parede, T_W^* é a temperatura da parede, d_1 é um coeficiente ajustável, Ω inclui todas as fronteiras do domínio e \mathbf{n} é a direção do vetor normal ao contorno. Ghazanfarian e Abbassi, (2009), fizeram uso de uma normalização onde o número de Knudsen aparece na equação governante do problema para simular uma escala pequena de transferência de calor. Para isto, utilizaram as seguintes variáveis adimensionais:

$$T^* = \frac{T - T_0}{T_h - T_0}, \quad t^* = \frac{t}{\tau_q}, \quad B = \frac{\tau_t}{\tau_q}, \quad Kn = \frac{\Lambda}{L_h}, \quad x^* = \frac{x}{L_h}, \quad y^* = \frac{y}{L_h} \quad (2.33)$$

onde, L_h representa o comprimento característico, Λ é o livre caminho médio, t é o tempo, Kn é o número de Knudsen e τ_q e τ_t são os tempo de relaxação do modelo de duplo retardo. Os coeficientes d_1 e B presentes nas Eqs. (2.32) e (2.33) devem ser determinados de um modo que os resultados do modelo de duplo retardo coincidam com a solução da equação de Boltzmann. Estes parâmetros são independentes do número de Knudsen, podem variar com o tempo e foram computados por:

$$B = \begin{cases} 0 & t^* > 1 \\ 0.1t^* & t^* \leq 1 \end{cases} \quad (2.34)$$

$$d_1 = \begin{cases} 0.5 & t^* > 0.1 \\ 0.7t^* & t^* \leq 0.1 \end{cases}$$

A equação governante do MCDR bidimensional com o uso das variáveis adimensionais da Eq. (2.33) para um problema sem geração de energia interna fica, portanto:

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial t^{*2}} = \frac{Kn^2}{3} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) + B \frac{Kn^2}{3} \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) \quad (2.35)$$

Todos os trabalhos envolvendo modelos com tempos de retardo até então haviam sido realizados considerando que não ocorrem saltos de temperatura nas fronteiras (Ghazanfarian e Abbassi, (2009)). Como o MCDR despreza os efeitos de espalhamento dos fônons nas fronteiras, resultados obtidos sem estas condições de contorno levam a resultados insatisfatórios especialmente próximos às fronteiras (Ghazanfarian e Abbassi, (2009)). Segundo os resultados exibidos no artigo, o novo modelo conseguiu obter com acurácia resultados atômicos da equação de transporte de Boltzmann utilizando o modelo de duplo retardo para $Kn=10$.

Ghazanfarian e Abbassi (2012) investigaram a condução de calor transiente bidimensional utilizando o MCDR em uma geometria de um transistor com um aquecedor no substrato. Para considerar o espalhamento dos fônons nas fronteiras da micro e nanoescala, foram utilizadas condições de contorno de salto de temperatura em todas as fronteiras (Ghazanfarian e Abbassi, 2009). O comprimento característico do problema foi escolhido como sendo aquele do aquecedor (L_h), sendo assim, este controla o número de Knudsen. Para resolver analiticamente o problema, foi utilizada uma combinação da técnica de transformação de Laplace e separação de variáveis, enquanto que um esquema de diferenças finitas de terceira ordem foi implementado para a geração de resultados numéricos. Constatou-se, através da distribuição de temperatura ao longo da linha central do substrato que o aumento do número de Knudsen revelou uma curva característica do MCDR mais forte e características difusivas mais fracas. Seus resultados mostraram que houve um aumento na temperatura na parede superior do substrato do transistor com o aumento do número de Knudsen, indicando, portanto, que quanto menor o dispositivo, os efeitos de espalhamento nas fronteiras se tornam cada vez mais importantes. Isto se deve ao fato característico da curva do MCDR que demonstra que sua solução é uma onda que reflete de volta na fronteira várias vezes antes de atingir o regime permanente (Ghazanfarian e Abbassi, (2012)). Os resultados deste trabalho foram comparados com aqueles obtidos tanto para o modelo

balístico difusivo (MBD) quanto para a equação de transporte de Boltzmann no primeiro caso do trabalho de Yang *et al* (2005), onde a temperatura das fronteiras é considerada aquela de emissão dos fônons, havendo, portanto um salto artificial de temperatura para o caso de superfícies negras.

Ghazanfarian e Shomali (2012) investigaram analiticamente a condução de calor transiente bidimensional, utilizando o MCDR em transistores de silício de 100nm x 10nm, aplicando fontes de calor uniformes e não uniformes. Foram utilizadas as condições de salto de temperatura como condição de contorno em todas as fronteiras. Para evitar os efeitos tridimensionais, as análises foram feitas em tempos de até 50ps. Os autores analisaram três casos diferentes. O primeiro caso apresentado em Ghazanfarian e Shomali (2012) é similar ao terceiro caso tratado por Yang *et al* (2005), ao qual seus resultados foram comparados. Segundo os resultados exibidos no artigo, o modelo foi capaz de prever o fluxo de calor e a distribuição de temperatura obtida pela equação de transporte de Boltzmann, com mais acurácia que o modelo balístico difusivo. O aumento do pico de temperatura ao longo da linha central como também o fluxo de calor foram investigados no instante $t=10ps$ e o MCDR não apresentou a frente de onda artificial que apresenta o MBD apresentado por Yang *et al* (2005). No segundo caso deste trabalho, a fronteira superior do dispositivo é exposta à temperatura ambiente, uma vez que no caso anterior se tratava de uma condição adiabática, para tornar a situação mais realística como também foi inserida uma fonte de calor não uniforme em relação à posição e assim foram detectados pontos de alto aquecimento (*hot spots*) dentro da estrutura do transistor em instantes diferentes de tempo. No terceiro caso foi investigado o campo de temperatura no transistor sob o efeito da adição de uma camada de dióxido de silício no transistor. Os resultados mostraram que esta camada retinha de calor, afetando assim o transporte das cargas elétricas no dispositivo e fazendo com que ocorressem picos de temperatura em um local próximo à porta do transistor (*gate*).

Moghaddam *et al.* (2014) também investigaram a implementação do MCDR na simulação de transferência de calor em nanoescala em transistores. Por conta dos efeitos de auto aquecimento, foi realizada uma investigação sobre qual tipo de material utilizar no *gate* e foi encontrado que a mudança de SiO₂ para HfO₂ pode ajudar na performance elétrica do dispositivo fazendo com que o pico temperatura diminua.

Nasri *et al.* (2015) estudaram a influência da condição de salto de temperatura de segunda ordem em um transistor de 100nm de comprimento, plano e horizontal. Resolveram

numericamente, através de diferenças finitas, o MCDR bidimensional acoplado com uma nova condição de contorno de salto de temperatura de primeira e segunda ordem em uma das interfaces do dispositivo. A distribuição de temperatura e o fluxo de calor na linha central do dispositivo foram investigados para geração de calor uniforme e não uniforme em três casos diferentes de condições de contorno. Em todos os casos a condição de contorno de salto de temperatura na interface SiO₂/Si foi utilizada. Para um dos casos foi estudado o efeito da resistência térmica no dreno e na fonte do transistor através da utilização da condição de contorno de Robin. Os autores constaram que aumentando a ordem da condição de contorno de salto de temperatura há um aumento nas colisões dos fônons com a parede, o que pode levar a um aumento significativo do fluxo de calor e da temperatura da estrutura. A equação de segunda ordem da condição de contorno com salto de temperatura é dada por:

$$T_s - T_w = -d_1 Kn \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_\Omega + d_2 \frac{Kn^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial n^2} \right)_\Omega \quad (2.36)$$

O coeficiente d_2 é dado por:

$$d_2 = \frac{\gamma^2 k_0^2}{Pr^2 2} \Lambda^2 \quad (2.37)$$

onde, Pr é o número de Prandtl, γ é a razão do calor específico, k_0 é um coeficiente próximo a um e Λ é o livre caminho médio das moléculas. O coeficiente d_2 é obtido uma vez que expandimos a série de Taylor no sistema de temperatura da parede. (Nasri *et al* 2015).

Em 2000, Tang e Araki utilizaram os problemas inversos para a estimação dos parâmetros do MCDR (os tempos de relaxação e a difusividade térmica) fazendo uso do método de Levenberg-Marquard em um problema unidimensional.

Mochacki, e Paruch (2013) fizeram uso da solução do problema inverso para estimar parâmetros do MCDR por meio de um algoritmo evolucionário em um problema de condução de calor em um filme fino de metal por um laser obtendo estimativas em boa

concordância com os valores exatos. O problema direto foi resolvido através da técnica de diferenças finitas.

Yang (2014) estimou a fonte de calor de um laser através da solução do problema inverso em um problema de condução com MCDR. A estimativa foi realizada através de uma abordagem numérica combinada com um conceito de tempo futuro sem a análise dos coeficientes de sensibilidade. Este método proposto por Yang (2014) mostrou a possibilidade de resolver um problema inverso sem precisar torná-lo não linear.

Wu *et al.* (2015) através de um algoritmo baseado no método do gradiente conjugado e do princípio da discrepância usaram problemas inversos com medidas simuladas em um problema modelado com o MCDR para estimar um pulso de calor em uma fronteira em um problema unidimensional em coordenadas cilíndricas.

2.6. MHCC E MCDR em Bio transferência de Calor

De acordo com a literatura, o modelo de condução de Fourier falha sob certas condições como, por exemplo, uma curta duração do laser de aquecimento, temperatura criogênicas, fluxos de calor altos e estruturas não homogêneas, que é o caso de tecidos biológicos (Kumar e Srivastava, 2015). A velocidade de propagação de calor é finita para os tecidos biológicos (Vedavarz *et al.* 1994, Kim e Guo 2007 apud Kumar e Srivastava, 2015), discordando, portanto do modelo de Fourier.

Pennes (1948) foi o pioneiro no estudo da bio transferência de calor e para tanto, assumia como equação constitutiva a Lei de Fourier. Porém, devido aos problemas citados acima para problemas envolvendo transferência de calor em tecidos biológicos, a equação de Pennes (1948) vem sendo combinada com o MHCC e também com o MCDR. Várias são as contribuições nesta área envolvendo o MHCC com a bio transferência de calor, envolvendo pulsos a laser de curta duração com a equação de transferência de calor por radiação em tecidos biológicos (Jaunich *et al.* 2008, Kim e Guo 2007), utilizando o aquecimento a laser na córnea humana (Marciak-Kozłowska e Kozłowski, 2011), investigando o efeito do fluxo sanguíneo e o tempo de relaxação em tecidos vivos durante um tratamento térmico (Shih *et al.*, 2012), entre outros.

O modelo de bio transferência de calor acoplado com o MHCC não considera os efeitos microestruturais. Portanto, devido a uma necessidade de incluir estes efeitos problemas que envolvem pulsos a laser de curta duração e alta intensidade, o MCDR vem sendo acoplado no estudo da bio transferência de calor. Existe na literatura uma grande quantidade de artigos neste contexto, como por exemplo, Xu *et al.* (2009), que modelaram a bio transferência de calor com o MCDR na pele humana. Fan e Wang (2015) resolveram analiticamente três tipos de problemas em bio transferência de calor com o MCDR, em tecido de pele e em tecido tumoral e compararam com soluções numéricas. Kumar e Srivastava (2015) acoplaram o MCDR com o modelo de transferência de calor por radiação para descrever a propagação da luz dentro de tecidos biológicos e resolveram o problema bidimensional numericamente, obtendo validação do modelo com outros dados da literatura, como também investigaram os efeitos dos tempos de retardo do MCDR nos perfis térmicos resultantes dentro do tecido biológico. Outros trabalhos na área de bio transferência de calor com MCDR podem ser encontrados em um trabalho de revisão realizado por Ghazanfarian *et al.* (2015).

2.7. Modelo Balístico Difusivo (MBD)

Desenvolvido por Chen (2001), o MBD de Condução de Calor é derivado da equação de transporte de Boltzmann sob a aproximação do tempo de relaxação (Eq. (2.38)). Faz-se uso do MDB em aplicações onde o comprimento característico do dispositivo é comparado ao livre caminho médio dos transportadores de calor e/ou o tempo característico é comparado ao tempo de relaxação do transportador de calor (Ghazanfarian *et al.* (2015)). Ao invés de utilizar a função de distribuição denotada por f , é preferível referir-se à notação de intensidade dos transportadores de calor, I , já que para os problemas a serem tratados com MBD o comprimento característico do dispositivo é comparado ao livre caminho médio e neste sentido muitas vezes não faz sentido falar sobre condutividade térmica, já que não se consegue estabelecer um gradiente de temperatura (Majumdar, 1993). Desta maneira, recorre-se à mecânica quântica, onde as partículas também são tratadas com características de onda e assim pode-se escrever o seu fluxo de energia por unidade de área em termos de intensidade.

A ideia central deste modelo consiste em dividir a função de distribuição dos transportadores de calor em qualquer ponto, em duas partes: uma balística e a outra difusiva (Eq.(2.39)).

$$\frac{\partial I_\omega}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r I_\omega = -\frac{I_\omega - I_{o\omega}}{\tau_\omega} \quad (2.38)$$

$$I = I_{b\omega} + I_{m\omega} \quad (2.39)$$

Nas Eqs. (2.38) e (2.39), I_ω representa a função de distribuição dos transportadores de calor, $I_{o\omega}$ é distribuição de equilíbrio, \mathbf{v} é a velocidade dos transportadores, τ_ω é o tempo de relaxação dos transportadores, que por sua vez depende da frequência angular ω e $I_{b\omega}$ e $I_{m\omega}$ são as funções das distribuições dos transportadores de calor referentes à parte balística e difusiva respectivamente.

Desta maneira, o fluxo de calor é dividido em dois componentes, o balístico e o difusivo. O componente originado da fronteira representa a natureza balística do transporte, enquanto que o componente provindo do espalhamento e excitação dos transportadores de calor é aproximado por um comportamento difusivo (Chen, 2001).

Substituindo a Eq. (2.39) em (2.38) podemos escrever para parte balística e difusiva as Eqs. (2.40) e (2.41) respectivamente, dadas por:

$$\frac{1}{|\mathbf{v}|} \frac{\partial I_{b\omega}}{\partial t} + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I_{b\omega} = -\frac{I_{b\omega}}{|\mathbf{v}| \tau_\omega} \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial I_{m\omega}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla I_{m\omega} = \frac{I_{m\omega} - I_{o\omega}}{\tau_\omega} \quad (2.41)$$

onde $\boldsymbol{\Omega}$ é o vetor unitário na direção de propagação.

A Eq. (2.40) tem solução dada por:

$$I_{b\omega}(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = I_{o\omega}(t - (s - s_0)/|\mathbf{v}|, \mathbf{r} - (s - s_0)\boldsymbol{\Omega}) \times \exp\left(-\int_{s_0}^s \frac{ds}{|\mathbf{v}| \tau_\omega}\right) \quad (2.42)$$

onde $I_{o\omega}$ é o valor da função de distribuição dos transportadores na fronteira no ponto $\mathbf{r} - (s - s_0)\boldsymbol{\Omega}$, na direção $\boldsymbol{\Omega}$ e $s - s_0$ é a distância ao longo da direção de propagação. O valor de $I_{o\omega}$ inclui todos os transportadores refletidos quanto os emitidos na fronteira.

Como explicado em Chen (2001), para a Eq. (2.41), para a componente difusiva, pode ser utilizada uma aproximação por difusão, a mesma utilizada em radiação térmica, introduzindo uma expansão harmônica esférica para $I_{m\omega}$. No entanto, é importante ter em mente que a aproximação por difusão não é válida perto da fronteira, onde normalmente a mesma falha (Modest, 1993).

A aproximação por difusão feita para Eq.(2.41) é dada por:

$$I_{m\omega}(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = J_{o\omega}(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + J_{1\omega}(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.43)$$

Combinando a Eq. (2.43) com a Eq.(2.41), multiplicando pelo vetor $\boldsymbol{\Omega}$ e integrando sob o ângulo sólido de todos os espaços, tem-se:

$$\frac{1}{|\mathbf{v}|} \frac{\partial J_{1\omega}}{\partial t} + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla J_{o\omega} = -\frac{J_{1\omega}}{\lambda_{\omega}} \quad (2.44)$$

Assim a intensidade é decomposta em uma parte balística e outra difusiva e o fluxo pode ser escrito como:

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{q}_b + \mathbf{q}_m \quad (2.45)$$

Onde,

$$\mathbf{q}_b = \int \left[\int I_{b\omega}(t, \mathbf{r}) \cos \theta d\Omega \right] d\omega \quad (2.46)$$

$$\mathbf{q}_m = \frac{4\pi}{3} \int \mathbf{J}_{1\omega} d\omega \quad (2.47)$$

A energia interna dos transportadores de calor pode também ser decomposta como a soma de uma parcela balística e difusiva. Portanto, sabendo que em sistemas onde há um desequilíbrio de transporte, neste caso devido ao regime balístico, a temperatura local é tomada como uma função da energia interna. Desta forma, energia interna total é relacionada com a temperatura equivalente através de:

$$\frac{du}{\partial t} = \frac{\partial u_b}{\partial t} + \frac{\partial u_m}{\partial t} = C \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.48)$$

Integrando a Eq. (2.44) sob o ângulo sólido e a frequência e fazendo uso da Eq. (2.48), obtém-se a equação constitutiva do componente difusivo, que é uma equação hiperbólica, dada por:

$$\tau \frac{\partial \mathbf{q}_m}{\partial t} + \mathbf{q}_m = -\frac{k}{C} \nabla u_m \quad (2.49)$$

onde k é a condutividade térmica dada por:

$$k = \int \frac{C_\omega |\mathbf{v}| \Lambda}{3} d\omega \quad (2.50)$$

Se a temperatura efetiva for tratada como u_m / C , representando a energia interna local, a Eq. (2.49), assemelha-se à equação constitutiva do MHCC (Chen, 2002). Porém, u_m e \mathbf{q}_m são apenas parte da energia interna e do fluxo de calor.

Combinando a equação de conservação da energia e as Eqs. (2.48) e (2.49) chegamos à seguinte equação:

$$\tau \frac{\partial^2 u_m}{\partial t^2} + \frac{\partial u_m}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{k}{C} \nabla u_m \right) - \nabla \cdot \mathbf{q}_b + \left(\dot{q}_e + \tau \frac{\partial \dot{q}_e}{\partial t} \right) \quad (2.51)$$

onde,

$$\tau \frac{\partial u_b}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_b = u_b \quad (2.52)$$

$$\mathbf{q}_b(t, \mathbf{r}) = \int \left[\int I_{\omega\omega} (t - (s - s_0)) / |\mathbf{v}|, \mathbf{r} - (s - s_0) \mathbf{\Omega} \right] \times \exp \left(- \int_{s_0}^s \frac{ds}{|\mathbf{v}| \tau_\omega} \right) \cos \theta d\Omega \Big] d\omega \quad (2.53)$$

Chen (2001) nomeou as Eqs. (2.42) e (2.51) de Equações Balístico-Difusiva de condução de calor. Pode-se perceber que a Eq. (2.52) difere da Equação do modelo de condução de Fourier por conter a componente do fluxo balístico, \mathbf{q}_b , que este por sua vez pode ser expresso em termos de valores das fronteiras (Eq. 2.53).

A formulação do modelo balístico difusivo implica que os transportadores originados das fronteiras são tratados como componentes balísticos. Tais componentes são transmitidos/emitidos por outro meio ou refletidos pelo mesmo meio. Pelo fato da fronteira não contribuir para o componente difusivo, o fluxo difusivo na fronteira é formado apenas de transportadores difusivos incidentes, sendo, portanto, dado por:

$$\mathbf{q}_m \cdot \mathbf{n} = - \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} < 0} I_{m\omega} \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} d\Omega \quad (2.54)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal perpendicular à fronteira.

Substituindo as Eqs. (2.43) e (2.47) em (2.54), tem-se o fluxo difusivo normal perpendicular à fronteira em termos da energia interna da componente difusiva dada por.

$$\mathbf{q}_m \cdot \mathbf{n} = - \frac{\mathbf{v} u_m}{2} \quad (2.55)$$

Chen (2001) e (2002) considerou em seus problemas de filmes finos que as fronteiras se comportavam como superfícies negras. Porém, a Eq. (2.54) pode ser aplicada para superfícies que não se comportem desta maneira acoplando a componente de reflexão com a componente balística e isto quer dizer que os valores da parte balística devem ser acoplados com os componentes da parte difusiva no mesmo local.

Combinando as Eq. (2.54) e (2.50) obtém-se a seguinte condição de contorno para o componente difusivo:

$$\tau \frac{\partial u_m}{\partial t} + u_m = - \frac{2\lambda}{3} \nabla u_m \cdot \mathbf{n} \quad (2.56)$$

Além da condição de contorno dada pela Eq. (2.56), no MBD é preciso especificar o componente balístico de transporte, cuja temperatura é especificada por meio da energia interna referente à parte balística, sendo esta chamada de temperatura de emissão do fônon. Segundo Yang *et al* (2005), na maioria dos problemas práticos de engenharia essa temperatura não é conhecida, sendo, portanto calculada a partir de um processo iterativo e

dadas a respectivas temperaturas equivalentes de equilíbrio na fronteira. A temperatura de emissão do fônon não representa a densidade local de energia na fronteira (Yang *et al*, 2002).

Desta maneira, a condição de contorno utilizando as equações balístico-difusivas deve especificar a intensidade em todas as direções do ângulo sólido incluindo aquelas entrando no domínio (saindo da fronteira) e aquelas saindo do domínio (entrando na fronteira). A densidade de energia local e também a temperatura correspondente que representa a soma dos fônons entrando e saindo da fronteira é diferente da temperatura de emissão dos fônons e é chamada de temperatura de equilíbrio equivalente (Yang *et al*, 2005).

Para o cálculo do componente balístico do fluxo de calor, também se leva em conta os componentes balísticos \mathbf{q}_{bo} e u_{bo} referentes ao equilíbrio no instante $t=0$. Considerando o sistema no limite de equilíbrio a uma temperatura T_o e que não há geração de energia interna, o lado esquerdo da Eq. (2.50) desaparece e é possível calcular u_{mo} . Uma vez calculados os u_{mo} e u_{bo} , obtém-se a temperatura de equilíbrio equivalente dada por:

$$u_o = u_{mo} + u_{bo} = CT_o \quad (2.57)$$

A distribuição de equilíbrio é calculada para obter-se a energia interna total de equilíbrio u_o , e por sua vez a temperatura equivalente de equilíbrio, que acontece quando os fônons que estão chegando à fronteira termalizam adiabaticamente com a mesma. Portanto, esta temperatura é diferente da temperatura de emissão dos fônons na fronteira. Sendo assim, é como se existissem duas temperaturas em um mesmo ponto, havendo, portanto, um salto de temperatura na fronteira.

No modelo de condução de Fourier e o MHCC não existe diferença entre a temperatura equivalente e a temperatura emitida pelos fônons, sendo então, a temperatura dos contornos bem especificada. Enquanto que ao utilizar o modelo balístico difusivo e a equação de transporte de Boltzmann, os contornos não possuem uma temperatura bem especificada devido à diferença das temperaturas equivalente e de emissão e isto que cria um salto de temperatura. O salto de temperatura existe quando há uma resistência térmica na fronteira.

No caso estudado por Chen (2002) considerou-se não haver reflexão dos fônons na fronteira de um filme fino, já que as superfícies foram tomadas com comportamento de superfície negra. Porém foi enfatizado que ao considerar superfícies não-negras a reflexão de

fônons realmente existirá, havendo, portanto uma resistência térmica na fronteira e, assim ocorrerá um salto de temperatura na fronteira.

Chen (2001, 2002) aplicou as equações do MBD em um problema transiente em um filme fino, sem geração de energia interna, onde considerou suas superfícies como negras, sendo que no instante inicial uma de suas superfícies emite fônons a uma temperatura T_1 , diferente da temperatura inicial T_0 . Chen (2001, 2002) comparou seus resultados da temperatura e do fluxo de calor com os obtidos pela equação de transporte de Boltzmann, pela Lei de Fourier e pelo MHCC para diferentes números de Knudsen, em diferentes instantes de tempo. Os trabalhos mostraram uma boa equivalência entre os resultados obtidos com as equações balístico-difusivas e a equação de transporte de Boltzmann, sendo que as curvas do fluxo de calor de ambos os casos aproximam-se mais do que suas curvas de temperatura devido à aproximação por difusão considerada no método que causa alguma inconsistência na definição de temperatura (Chen, 2002). Os resultados obtidos pela Lei de Fourier e pelo MHCC levaram a resultados errôneos, porém, todos os modelos apresentaram uma melhor concordância entre si para um número de Knudsen pequeno e à medida que a transferência de calor caminha para o regime permanente.

Yang *et al* (2005) apresentaram soluções para simulações multidimensionais em nanoescala utilizando o MBD e a equação de Boltzmann, utilizando diferentes condições de contorno e também geração de energia interna. Nesta pesquisa os autores analisaram três casos diferentes em uma geometria similar a de um transistor do tipo MOSFET. No primeiro e segundo caso todas as superfícies possuíam temperatura T_0 , exceto uma delas que aumentava de temperatura subitamente para T_1 . No primeiro caso T_0 e T_1 foram tratadas como a temperatura de emissão dos fônons e no segundo caso como temperatura equivalente de equilíbrio. No terceiro caso, os autores investigaram a transferência de calor no transistor dada à inclusão de uma fonte de geração de calor nanométrica, onde suas fronteiras mantiveram-se adiabaticamente e apenas uma delas a temperatura T_0 , sendo esta última considerada como temperatura de equilíbrio equivalente. No primeiro e segundo caso os resultados mostraram-se em boa concordância com aqueles obtidos com a equação de transporte de Boltzmann. Porém, no segundo caso é possível observar que a Lei de Fourier prevê o fluxo de calor em inúmeras vezes comparado com o obtido pela equação de Boltzmann para $Kn=10$. Através dos resultados do terceiro caso é possível observar que o pico de temperatura previsto pela lei de Fourier é muito menor do que aqueles previstos pelo MBD e pela equação de transporte de Boltzmann. Porém, a Lei de Fourier abrange uma área

afetada muito maior do que os outros modelos, já que este assume uma condutividade térmica grande e uma propagação de velocidade dos transportadores de calor infinita. O fluxo de calor obtido pela lei de Fourier é maior em diversas vezes o fluxo obtido pela solução da equação de Boltzmann, especialmente em escalas pequenas de tempo. Como resultados gerais, os autores constaram que com a existência de uma fonte de geração de calor, a diferença relativa entre os resultados obtidos pela equação de transporte de Boltzmann e o MBD é bem maior, enquanto que sem a fonte estas diferenças são praticamente desprezíveis. Os resultados do terceiro caso obtidos pelo MBD foram bem melhores do que os obtidos pela Lei de Fourier quando comparados aos da Equação de Boltzmann, apresentando erros relativos de 25% e 85% respectivamente. Yang *et al* (2002) apresentaram resultados similares aos de Yang *et al* (2005), porém para diferentes instantes de tempo.

CAPÍTULO III

3. JUSTIFICATIVA E OBJETIVOS DO TRABALHO

Este Capítulo destina-se a esclarecer os pontos que justificam a escolha do tema deste trabalho tendo em vista a sua motivação e a revisão bibliográfica apresentada. São apresentados os objetivos que norteiam este trabalho, geral e específicos, como também a contribuição deste trabalho.

3.1. Justificativa

Os transistores são dispositivos feitos de semicondutores, que através de pequenas mudanças na voltagem permitem ligar ou desligar conexões em um circuito eletrônico, como também amplificar sinais através do controle de uma corrente elétrica. À medida que a densidade de um transistor cresce, também cresce a quantidade de calor gerada dentro destes dispositivos. A dissipação de calor tornou-se um fator de projeto limitante no aumento contínuo da eficiência de nano e micro sistemas eletrônicos (Norris, 2014). Portanto, um entendimento acerca da energia dissipada e transportada em estruturas micro e nanométricas são de grande importância para o design de circuitos e sistemas de conversão de energia eficientes (Pop, 2010). Pop (2010) apresentou uma revisão acerca do entendimento e manipulação de energia dissipada no transporte em nanoescala de estruturas no estado sólido, com foco em circuitos em nanoescala, transistores de silício, nanoestruturas de carbono e nanofios semicondutores.

A potência de dissipação limita a performance dos componentes eletrônicos, desde dispositivos móveis até centros de dados, todos baseados na micro e nanotecnologia. Os filmes finos são importantes componentes em vários dispositivos microeletrônicos (Barron e Dai, 2006). A contínua redução do tamanho dos componentes causa um aumento nas tensões térmicas nos filmes e conseqüentemente nos dispositivos aos quais eles pertencem, sendo, portanto, de extrema importância o estudo de transferência de calor em filmes finos para aplicações micro e nano tecnológicas (Barron e Dai, 2006). Para tanto, deve-se empregar modelos de condução de calor, bem como estudar os efeitos de pico de temperatura, fluxo de calor, condições de contorno e de interfaces adequadas.

Em problemas de aquecimento em dispositivos microeletrônicos envolvendo situações de baixa temperatura próximas do zero absoluto ou fontes de calor como laser, a propagação de calor tem velocidade finita. A solução da equação de Boltzmann é a opção com mais fidedigna para modelar este tipo de problema. No entanto, a equação de Boltzmann é geralmente difícil de ser resolvida e outros modelos foram propostos para levar em conta essa velocidade finita da propagação do calor (Basirat *et al.* 2006).

Chen (2001) propôs uma aproximação da equação de Boltzmann, que são as equações Balísticas Difusivas, onde a transferência de calor é tratada em duas partes: a primeira representa a natureza balística da condução de calor originada do espalhamento dos transportadores de calor nas fronteiras e a outra leva em conta apenas o retardo do comportamento difusivo do fluxo de calor.

Os resultados dos trabalhos de Chen (2001, 2002) e Yang *et al.* (2005) mostraram uma boa concordância do modelo balístico difusivo com a equação de transporte de Boltzmann unidimensional e bidimensional, sugerindo um salto de temperatura na parede do transistor devido à reflexão dos fônons. Nos anos recentes, o MCDR vem sendo utilizado para simular a transferência de calor em micro e nano estruturas. Porém, quando comparado ao MBD, proposto por Chen (2001, 2002) percebe-se que o MCDR não impõe nenhuma condição de contorno que considere a reflexão dos transportadores de calor nas fronteiras, como também não faz diferença entre a temperatura equivalente do meio e a temperatura de emissão dos fônons. Logo, quando se toma uma condição de contorno com uma temperatura bem especificada para a fronteira, o efeito de resistência térmica junto à mesma seja desprezado, o que pode levar a resultados errôneos quando se trata de problemas cuja dimensão é proporcional ao livre caminho médio dos transportadores de calor.

Ghazanfarian e Abbassi (2009) foram os primeiros a impor uma condição de contorno de salto de temperatura para as fronteiras, juntamente com o MCDR. Ghazanfarian e Abbassi (2009) estudaram o mesmo caso apresentado por Chen (2002), comparando seus resultados com o modelo balístico difusivo e com os da equação de transporte de Boltzmann para os mesmos números de Knudsen ($Kn=0.1$; $Kn=1$; $Kn=10$) e os mesmo intervalos de tempo. Para o caso de $Kn=0.1$, à medida que o tempo de simulação aumentou, os resultados obtidos através do MCDR mostraram-se mais concordantes com aqueles obtidos pela ETB do que os do MBD. Quando o tempo de simulação atingiu o regime estacionário, o MCDR tornou-se o modelo de MHCC e também mostrou bons resultados com o MBD para prever

o fluxo de calor. Para o caso onde $Kn=1$ também foi constatado que a medida que o tempo aumenta, aumenta a acurácia do MCDR em relação ao MBD, porém que ao aumentar o número de Knudsen a acurácia do fluxo de calor diminui. Para o caso onde $Kn=10$ constatou-se uma discordância maior especialmente para o fluxo de calor obtido pelo MCDR e entre o obtido pelo MBD a medida que o tempo aumenta.

Ghazanfarian e Abbassi (2009) chegaram à conclusão que para pequenos números de Knudsen os resultados dos MCDR e MBD apresentaram-se mais concordantes, inclusive próximo as fronteiras. Apesar de que os resultados obtidos para $Kn=10$ não apresentaram a mesma convergência como aqueles dos casos onde $Kn=0.1$ e $Kn=1$, os autores indicam fortemente o uso do MCDR, com a condição de contorno de salto de temperatura para problemas de nano e micro escalas de condução de calor devido à simplicidade do MCDR e à possibilidade obter problemas em mais de uma dimensão.

Devido à tendência constante de miniaturização dos dispositivos eletrônicos existentes atualmente, onde o modelo de condução de calor de Fourier não é mais válido, bem como devido à importância de estudar e avaliar os picos de temperatura e fluxo de calor nos dispositivos eletrônicos já que a potência dissipada limita a vida útil destes dispositivos, e também ao grande número de artigos que vem sendo publicados sobre o modelo de condução de duplo retardo, despertou-se o interesse no estudo de transferência de calor com este modelo em transistores. Os avanços tecnológicos em diversas áreas, inclusive em transferência de calor, vem abrindo espaço para o uso de novos materiais cujas propriedades necessitam ser totalmente conhecidas sob certas condições de trabalho.

O uso dos problemas inversos na área de transferência de calor torna-se uma ferramenta extremamente importante para a estimação de parâmetros e funções envolvidas em problemas de condução de calor. Foram encontrados na literatura alguns trabalhos que fizeram da solução do problema inverso para estimativas de parâmetros com modelo de condução de duplo retardo, como citado no Capítulo II, tais como: Tang e Araki, (2000); Mochnacki, e Paruch (2013), Yang (2014) e Wu *et al* (2015).

Este trabalho tem como principais contribuições estimar parâmetros do modelo de condução de duplo retardo pela solução de problemas inversos através de técnicas Bayesianas em um problema de condução de calor bidimensional em um transistor do tipo MOSFET (*metal-oxide-semiconductor field-effect*) utilizando uma condição de contorno que simula a difusão dos fônons da parede do transistor a partir do fluxo de calor do modelo de condução

de duplo retardo, que até então não havia sido utilizada para este tipo de problema. Os tempos de relaxação do MCDR são quantidades de interesse no projeto e planejamento de transistores no que diz respeito à transferência de calor que ocorre no meio e que por sua vez, não podem ser medidos por técnicas padrões, como a difusividade e a condutividade térmica. A estabilidade das cadeias de Markov geradas a partir do algoritmo Metropolis-Hastings permite quantificar a solução do problema direto com respeito aos efeitos das incertezas dos parâmetros. Os resultados deste trabalho demonstram que as incertezas da solução do problema direto resultantes das incertezas dos parâmetros estimados são menores para o problema de condução de calor utilizando o MCDR em transistores do tipo MOSFET.

No âmbito que diz respeito à formulação matemática do problema encontrada na literatura para este tipo de problema, utilizaremos uma condição de contorno similar àquela apresentada em Ghazanfarian e Abbassi (2012) que simula a difusão dos fônons na fronteira, porém reescrevendo-a com o fluxo prescrito pelo MCDR um problema onde $Kn=10$.

No âmbito do que diz respeito aos trabalhos encontrados na literatura envolvendo a solução do problema inverso e o modelo de duplo retardo, Mochnacki, e Paruch (2013) e Tang e Araki, (2000) trataram de estimativas de parâmetros do modelo em filmes finos de metais. Yang (2014) estimou a fonte de calor provinda do laser para o aquecimento de um filme fino de metal. Sobre as abordagens para a solução do problema inverso, Mochnacki, e Paruch (2013) resolveram através de algoritmos evolucionários em um problema unidimensional; Yang (2014) através de uma abordagem numérica combinada com um conceito de tempo futuro sem a necessidade de realizar a análise dos coeficientes de sensibilidade e Tang e Araki (2000) fizeram uso do método de Levenberg-Marquard em um problema unidimensional. Nesta tese de doutorado, se fará uso de uma abordagem através de técnicas Bayesianas em um problema de condução de calor bidimensional em um semiconductor. Devido à falta de dados experimentais na literatura sobre os tempos de relaxação tanto do MCDR quanto do MEF, faz-se uso de *prioris* não informativas através dos tempos de relaxação dos MEF para semicondutores (Verdavaz, 1994).

3.2. Objetivos

Objetivo Geral

Esta pesquisa tem como objetivo estimar os parâmetros do modelo de condução de Duplo Retardo, com foco nos tempos de relaxação, em problemas multidimensionais direcionados a dispositivos microeletrônicos, fazendo uso dos Problemas Inversos através da abordagem via Inferência Bayesiana.

Objetivos Específicos

Como objetivos específicos esta pesquisa tem a verificação da solução obtida por elementos finitos com o MCDR com uma solução analítica da literatura; o uso da condição de contorno de salto de temperatura com o fluxo descrito pelo modelo de condução de Duplo Retardo a comparação das incertezas associadas à solução do problema inverso com os parâmetros estimados em relação àquelas das medidas simuladas e por fim, a estimativa indireta dos tempos de relaxação do modelo de espalhamento de fônons.

CAPÍTULO IV

4. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA DE PROBLEMAS INVERSOS

Neste capítulo apresenta-se uma abordagem sobre Problemas Inversos, sua fundamentação teórica e como podem ser classificados os problemas inversos na área de transferência de calor.

4.1. A Abordagem do Problema Inverso

Um problema inverso consiste em quando se deseja estimar parâmetros ou funções a partir de certas grandezas observáveis e dependentes dos mesmos. A Figura 4.1 apresenta um esquema ilustrativo do problema direto e do problema inverso.

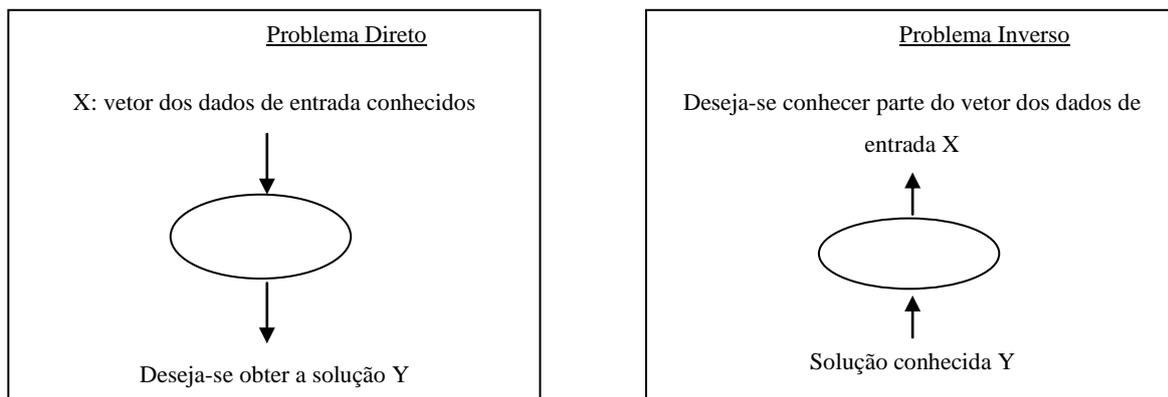


Figura 4.1: Esquema ilustrativo do problema e do problema inverso

Fonte: Battaglia e Maillet (2010)

Segundo Özisik e Orlande (2000), no que diz respeito aos problemas inversos, a terminologia estimação deve ser utilizada ao invés de determinação. Isto se deve pelo fato que a quantidade recuperada em um problema inverso não é exata, mas sim apenas uma estimativa com incertezas.

Os problemas inversos são classificados matematicamente como mal postos. A definição de problema bem posto deu-se por um matemático francês de nome Jacques Hadamard (1923) como um problema cuja solução deve obedecer a três condições: a solução

existe; solução deve ser única e a solução deve ser estável em relação a pequenas mudanças nos dados de entrada. Como os problemas inversos geralmente não obedecem a pelo menos uma destas três condições, os mesmo são classificados como problemas mal postos, fazendo com que haja a necessidade de usar técnicas de regularização como as de Alifanov (1994) e Tikhonov (1997) (Orlande, 2000).

Uma solução bem sucedida de um problema inverso geralmente envolve uma reformulação de modo que este se aproxime de um problema bem posto. Uma abordagem comum envolve esta reformulação em termos de um problema de minimização.

De acordo com Beck e Arnold (1977) a precisão da solução obtida por um problema inverso é afetada pelos erros existentes nas medidas das temperaturas, portanto faz-se necessário possuir informações a respeito dos erros de medição. Beck e Arnold (1977) apresentam oito suposições padrão a respeito da descrição estatística destes erros, sendo estas: erros são aditivos; a média dos erros é zero; a variância dos erros deve ser constante; os erros associados a diferentes medidas não são correlacionados, ou seja, a covariância é zero e as medidas não são dependentes; os erros possuem distribuição normal; os parâmetros estatísticos descrevendo os erros, como a matriz de covariância, são conhecidos; as únicas variáveis que contém erros aleatórios são as temperaturas medidas, todo o restante é conhecido com precisão; não há nenhuma informação prévia a respeito das quantidades a serem estimadas (se houver alguma informação, esta deve ser utilizada para melhorar a estimação).

Os parâmetros desconhecidos envolvidos no problema e as medidas experimentais (ou simuladas) de temperatura são respectivamente representados na forma vetorial, como:

$$\mathbf{P}^T \equiv [P_1, P_2, \dots, P_N] \quad (4.1)$$

$$\mathbf{Y}^T = \left(\vec{Y}_1, \vec{Y}_2, \dots, \vec{Y}_I \right) \quad (4.2)$$

onde N é o número de parâmetros e \mathbf{Y}_i representa as temperaturas medidas por M sensores no tempo t_i , com $i = 1, 2, \dots, I$, isto é,

$$\vec{Y}_i = (Y_{i1}, Y_{i2}, \dots, Y_{iM}), \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, I. \quad (4.3)$$

A função de verossimilhança para problemas que obedecem às hipóteses de 1 a 8 citadas anteriormente, designada pela Eq. (4.4), fornece informação relativa à distribuição probabilística das medidas, conhecendo-se \mathbf{P} .

$$\pi(\mathbf{Y} | \mathbf{P}) = (2\pi)^{-1/2} |\mathbf{W}|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P}))^T \mathbf{W}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P})) \right] \quad (4.4)$$

onde $\mathbf{T}(\mathbf{P})$ é a solução do problema direto e \mathbf{W} é a matriz de covariância das medidas dada por:

$$\mathbf{W} = \sigma^2 \mathbf{I} \quad (4.5)$$

onde \mathbf{I} representa a matriz identidade e σ^2 a variância.

Através da maximização da função da verossimilhança é possível obter uma solução para o problema inverso. Para tanto, é preciso minimizar o expoente da Eq. (4.4) (Beck e Arnold, 1977), que resulta na função objetivo de máxima verossimilhança dada por:

$$S(\mathbf{P}) = [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P})]^T \mathbf{W}^{-1} [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P})] \quad (4.6)$$

A norma dos mínimos quadrados pode ser obtida como um caso particular da Eq. (4.6), já que se supõem medidas não correlacionadas e com variância constante:

$$S(\mathbf{P}) = [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P})]^T [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P})] \quad (4.7)$$

4.1.1. Coeficientes de Sensibilidade

No âmbito dos Problemas Inversos, para a estimação de parâmetros e funções é de extrema importância definir o conceito de coeficientes de sensibilidade. Os coeficientes de sensibilidade, designados aqui por J_{ij} , são definidos como a primeira derivada da variável medida em determinado instante e posição, nesse caso a temperatura, com respeito ao parâmetro, P_j , do modelo, dado por:

$$J_{ij} = \frac{\partial T_i}{\partial P_j} \quad (4.8)$$

onde $i=1, 2, \dots, D$, sendo D o número total de medições, $j=1, 2, \dots, N$ sendo N número total de parâmetros desconhecidos, T_i é a temperatura estimada, P_j é o parâmetro desconhecido. Sendo assim o coeficiente de sensibilidade, é a medida de sensibilidade da temperatura estimada T_i com respeito às mudanças do parâmetro P_j .

Uma magnitude pequena do coeficiente de sensibilidade J_{ij} indica que grandes mudanças no parâmetro P_j afetam muito pouco a temperatura estimada T_i . Neste caso, a estimação de parâmetros é bastante difícil, pois grandes mudanças na temperatura estimada T_i , correspondem a uma larga faixa de valores para os parâmetros. O ideal é que se possam coeficientes de sensibilidade J_{ij} com magnitudes altas para que o problema inverso não seja tão sensível aos erros de medição e para que uma maior precisão na estimação dos parâmetros possa ser alcançada. Outro aspecto que deve ser observado é a dependência linear dos coeficientes de sensibilidade, já que uma vez existente torna-se impossível a estimação simultânea dos seus respectivos parâmetros.

A matriz de sensibilidade ou matriz Jacobiana é formada pelos coeficientes de sensibilidade J_{ij} , com relação os diversos parâmetros P_j a serem analisados no modelo. Uma análise de sensibilidade consiste em estudar a evolução dos coeficientes de sensibilidade em relação ao tempo decorrido como critério de avaliação da possibilidade de estimativa dos parâmetros. A matriz de sensibilidade é definida por:

$$J(P) = \left[\frac{\partial T^T(P)}{\partial P} \right]^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial T_1}{\partial P_1} & \frac{\partial T_1}{\partial P_2} & \frac{\partial T_1}{\partial P_3} & \dots & \frac{\partial T_1}{\partial P_N} \\ \frac{\partial T_2}{\partial P_1} & \frac{\partial T_2}{\partial P_2} & \frac{\partial T_2}{\partial P_3} & \dots & \frac{\partial T_2}{\partial P_N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial T_l}{\partial P_1} & \frac{\partial T_l}{\partial P_2} & \frac{\partial T_l}{\partial P_3} & \dots & \frac{\partial T_l}{\partial P_N} \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

Para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade utilizou-se neste trabalho a abordagem por aproximação por diferenças finitas, onde as equações que apresentam o cálculo dos coeficientes de sensibilidade através da aproximação por diferenças finitas avançadas e centradas são respectivamente:

$$J_{ij} \approx \frac{T_i(P_1, P_2, \dots, P_j + \varepsilon P_j, \dots, P_N) - T_i(P_1, P_2, \dots, P_j, \dots, P_N)}{\varepsilon P_j} \quad (4.10)$$

$$J_{ij} \approx \frac{T_i(P_1, P_2, \dots, P_j + \varepsilon P_j, \dots, P_N) - T_i(P_1, P_2, \dots, P_j - \varepsilon P_j, \dots, P_N)}{2\varepsilon P_j} \quad (4.11)$$

Quando os parâmetros envolvidos no problema possuem diferentes ordens de magnitude há uma dificuldade na investigação da dependência linear entre os mesmos, já que os seus coeficientes de sensibilidade também possuem ordens de grandeza diferentes. Sendo assim, nestes casos opta-se por utilizar o coeficiente de sensibilidade reduzido, dado por:

$$J_{ij} = P_j \frac{\partial T_i}{\partial P_j} \quad (4.12)$$

4.1.2. Projeto Ótimo de Experimentos

A análise dos coeficientes de sensibilidade, como já foi dito anteriormente, é de extrema importância para a identificação de pequenas magnitudes dos coeficientes e dos períodos de dependência linear entre os mesmos, possibilitando ou não a estimativa simultânea destes parâmetros. A questão é que períodos onde há pequenas magnitudes dos coeficientes e dependência linear não contribuem com informação útil na estimativa dos parâmetros através da técnica de análise inversa. Portanto, faz-se uso da técnica de projeto ótimo de experimentos.

A metodologia de Projeto de Experimentos foi desenvolvida na década de 1920 por Sir. R. A. Fisher, na Rothamsted Agricultural Field Research Station em Londres (Rowlands, 2003). Em sua metodologia, Fisher inseriu na investigação de projeto de experimentos pensamentos e princípios estatísticos, incluindo o conceito de planejamento fatorial e a análise de variância. A utilização do projeto de experimentos baseados em fundamentos estatísticos proporciona a obtenção de mais informações do problema em questão (Montgomery, 1997).

A fim de otimizar o experimento faz-se uso do critério D-ótimo que contribui para a escolha correta das variáveis experimentais. Este critério visa a otimização através da minimização do hiper-volume da região de confiança das estimativas, fazendo com que as mesmas possuam a mínima variância possível. A região de confiança com probabilidade p é aquela região do espaço de variáveis que concentra uma probabilidade definida e igual a p dos possíveis valores para os parâmetros estimados. Sendo assim, para minimizar região de confiança, deve-se maximizar o determinante de \mathbf{V}^{-1} (onde \mathbf{V} é a matriz de covariância dos parâmetros) fazendo (Ozisik e Orlande, 2000):

$$\max \det(\mathbf{J}^T \mathbf{J}) \quad (4.13)$$

A matriz $(\mathbf{J}^T \mathbf{J})$ é também conhecida como Matriz de Informação de Fisher, \mathbf{F} . Cada elemento da matriz de informação de Fisher, $\mathbf{F}_{m,n}$, é dado pela Eq. (4.14), onde D é o número de medidas, t_f é a duração do experimento, M é o número de sensores e os índices m e n referem-se às linhas e às colunas da matriz. A Eq. (4.14) é utilizada quando existe um grande, porém fixo, número de medidas (Ozisik e Orlande, 2000). No caso abordado neste

trabalho, existe apenas um único sensor, sendo então a matriz de informação de Fisher descrita pela Eq. (4.15).

$$[F_I^*]_{m,n} = \frac{1}{Mt_f} \sum_{i=1}^M \int_{t=0}^{t_f} \left(\frac{\partial T_i}{\partial P_m} \right) \left(\frac{\partial T_i}{\partial P_n} \right) dt \quad \text{para } m, n = 1, \dots, N_{par} \quad (4.14)$$

$$[F_I^*]_{m,n} = \sum_{i=1}^I \left(\frac{\partial T_i}{\partial P_m} \right) \left(\frac{\partial T_i}{\partial P_n} \right) \quad \text{para } m, n = 1, \dots, N_{par} \quad (4.15)$$

4.2. Problemas Inversos Via Inferência Bayesiana

Os métodos Bayesianos são diferentes dos métodos clássicos da Estatística, pois permitem a inclusão de informações *a priori* sobre os parâmetros do modelo, considerando que os parâmetros de interesse são variáveis aleatórias podendo-lhes ser atribuídos distribuições de probabilidades.

Portanto, a inferência Bayesiana opera na presença de observações \mathbf{Y} descritas por uma função de probabilidade $\pi(\mathbf{Y}|\mathbf{P})$, que é chamada de função de verossimilhança de \mathbf{P} . A função de verossimilhança carrega a informação da chance de cada valor de \mathbf{P} ter levado àquele valor observado da grandeza \mathbf{Y} . A informação *a priori*, descrita por $\pi(\mathbf{P})$ é acrescentada com o intuito de minimizar as incertezas sobre os parâmetros e contém a distribuição de probabilidade de \mathbf{P} antes da observação de \mathbf{Y} .

As distribuições de Probabilidade da verossimilhança e da *priori* quando combinadas fornecem a distribuição de probabilidade de \mathbf{P} após as observações sobre o valor de \mathbf{Y} , que é chamada de distribuição *a posteriori*, como pode ser visto pela Eq. (4.16) O mecanismo formal para obtenção da distribuição condicional de probabilidade $\pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y})$ é conhecido como Teorema de Bayes. Sendo \mathbf{P} e \mathbf{Y} variáveis contínuas e aleatórias, podemos escrever (Kaipio e Somersalo, 2004):

$$\pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y}) = \frac{\pi(\mathbf{P}, \mathbf{Y})}{\pi(\mathbf{Y})} \quad (4.16)$$

A probabilidade condicional pode ser escrita em termos da função de verossimilhança e da *priori*, como:

$$\pi(\mathbf{P}, \mathbf{Y}) = \pi(\mathbf{Y} | \mathbf{P})\pi(\mathbf{P}) \quad (4.17)$$

Substituindo a Eq. (4.17) na Eq. (4.16), obtém-se o Teorema de Bayes (Kaipio e Somersalo, 2004):

$$\pi_{\text{Posteriori}}(\mathbf{P}) = \pi(\mathbf{P} | \mathbf{Y}) = \frac{\pi(\mathbf{Y} | \mathbf{P})\pi(\mathbf{P})}{\pi(\mathbf{Y})} \quad (4.18)$$

A função de distribuição de probabilidade $\pi(\mathbf{Y})$ nos informa a probabilidade de densidade marginal das medições e atua como uma constante de normalização. Sendo $\pi(\mathbf{Y})$ de difícil cálculo e geralmente não sendo necessária para os cálculos, o teorema de Bayes é normalmente escrito por:

$$\pi_{\text{Posteriori}}(\mathbf{P}) = \pi(\mathbf{P} | \mathbf{Y}) \propto \pi(\mathbf{Y} | \mathbf{P})\pi(\mathbf{P}) \quad (4.19)$$

Para inferência Bayesiana, a ordem em que as observações são processadas, é irrelevante. Pela Eq. (4.19) observa-se que a probabilidade *a posteriori* será pequena se a função de verossimilhança ou a distribuição à priori forem pequenas. Neste contexto, ressalta-se a importância da distribuição *a priori* dada para aos parâmetros, que representa probabilisticamente o conhecimento que se tem sobre os mesmos antes das realizações dos experimentos. A distribuição *a priori* pode ser especificada por uma distribuição informativa ou não informativa, dependendo do grau de informação que se tem a respeito do parâmetro.

Supondo que os parâmetros \mathbf{P} tenham uma distribuição a priori Gaussiana com média $\boldsymbol{\mu}$ e matriz de covariância \mathbf{V} a distribuição *a priori* para os parâmetros pode ser escrita como (BECK e ARNOLD, 1977; KAPIO e SOMERSALO, 2004):

$$\pi(\mathbf{P}) = (2\pi)^{-1/2} |\mathbf{V}|^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{P} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{P} - \boldsymbol{\mu})\right] \quad (4.20)$$

Neste caso, as estimativas pontuais para os parâmetros podem ser obtidas através da maximização da distribuição a posteriori, que é obtida através da minimização da função objetivo dada por:

$$S_{MAP}(\mathbf{P}) = [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P})]^T \mathbf{W}^{-1} [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P})] + (\boldsymbol{\mu} - \mathbf{P})^T \mathbf{V}^{-1} (\boldsymbol{\mu} - \mathbf{P}) \quad (4.21)$$

Portanto, a solução de um problema inverso dentro da abordagem que se baseia na análise da densidade de probabilidade a posteriori, que nada mais é a distribuição de probabilidade condicional dos parâmetros dadas as medidas experimentais (Beck e Arnold, 1977), é utilizada com as seguintes hipóteses (Kaipio, 2004): as variáveis incluídas no modelo são aleatórias; a aleatoriedade descreve a incerteza a respeito da realização dos experimentos; o grau de informação a respeito das variáveis é codificado através de distribuições de probabilidade; o mecanismo para combinar as informações apontadas pelas medidas com aquelas supostas para os parâmetros antes da realização das medidas é representado pelo teorema de Bayes.

4.3. Problemas Inversos em Transferência de Calor

Os avanços tecnológicos em diversas áreas, inclusive em transferência de calor, vem abrindo espaço para o uso de novos materiais cujas propriedades necessitam ser totalmente conhecidas sob certas condições de trabalho. Sendo assim, o uso dos problemas inversos na área de transferência de calor torna-se uma ferramenta extremamente importante para a estimação de parâmetros e funções envolvidas em problemas de condução de calor. A principal vantagem da aplicação dos problemas inversos na transferência de calor é que se torna possível conduzir experimentos o mais próximo possível das condições reais.

Os problemas inversos em transferência de calor podem ser classificados de diversas maneiras, sendo aqui expostas algumas delas (Özisik e Orlande, 2000; Battaglia e Maillet (2010):

1. De acordo com a natureza do processo de transferência de calor: de condução, de convecção, de radiação, de radiação e condução simultânea, de condução e convecção simultânea ou ainda de mudança de fase.
2. Quanto à dimensão em que ocorre a transferência de calor: uni, bi ou tridimensional.
3. Classificados como lineares ou não lineares
4. Classificados quanto à natureza da informação adicional para resolver o problema inverso, podendo ser de uma maneira geral:
 - Problemas Inversos de medições: a informação se encontra no sinal de saída do sensor
 - Problemas de Controle: As medições de saída do sensor são trocadas por valores desejados de saída. Nesta categoria, a quantidade a ser estimada geralmente é a fonte ou condição inicial do problema, porém também pode ser um parâmetro estrutural. Neste caso, nem sempre é possível alcançar os valores desejados por razões físicas ou matemáticas sendo necessário, muitas vezes, impor certo número de restrições na solução buscada.
 - Problemas de identificação do sistema: Podem ser divididos em duas categorias, sejam elas:
 - Redução de Modelo: A solução direta de um modelo detalhado é completamente conhecida e parte dos parâmetros estruturais de um modelo reduzido de uma dada estrutura é buscada. Os dois modelos compartilham das mesmas condições iniciais e do mesmo estímulo (fonte). A redução pode ser matemática ou física e em ambos os casos

os parâmetros estruturais do modelo reduzido dependem dos parâmetros correspondentes do modelo detalhado.

- Identificação experimental do modelo: A solução direta do problema é conhecida, como também a fonte, as condições de contorno e a condição inicial e parte dos parâmetros estruturais desconhecida, sendo este último o que se deseja estimar.

A identificação do sistema leva a classificar os modelos em três tipos: de caixa branca, caixa preta e caixa cinza. No primeiro tipo, enquadram-se os modelos que se baseiam em equações baseadas nos princípios de conservação, onde a natureza dos parâmetros destes modelos é completamente conhecida. Portanto, são utilizados para estimação de propriedades termofísicas. No segundo enquadram-se os modelos baseados em experimentos, sem informação *a priori* sobre sua estrutura, onde parâmetros deste modelo possuem apenas significado matemático, mas não físico. E por fim, no terceiro tipo, encaixam-se os modelos que seus parâmetros e estrutura são escolhidos de acordo com alguma percepção física ou pelo o que está acontecendo no sistema e estes parâmetros são estimados em uma base experimental.

5. De acordo com a natureza da causa a ser estimada, podendo ser:

- Problemas inversos de estimação de parâmetros:
 - Propriedades termofísicas: Parâmetros intrínsecos que podem ser utilizados para diferentes configurações de simulações e experimentos e que são buscados através de medições experimentais. Pertencem à esta categoria os problemas de caixa branca descritos anteriormente.

- Problemas de identificação do sistema: Parâmetros estruturais de um modelo ad hoc são buscados através de uma caracterização experimental. Pertencem a esta categoria os problemas de caixa preta e cinza descritos anteriormente.
- Problemas Inversos de estimação de dados de entrada: Consiste em encontrar valores e localização para o termo fonte do problema ou também para uma diferença de temperatura imposta dentro do domínio ou na fronteira do sistema. A solução deste tipo de problema inverso é específica para cada experimento, diferentemente da solução de um problema de estimação de parâmetros intrínsecos.
- Problema Inversos de estimação do estado inicial: A solução deste tipo de problema inverso também é específica para cada caso.
- Problemas Inversos de reconstrução da forma: Se encaixam nesta categoria os problemas onde a forma do domínio ou a localização de interfaces entre os subdomínios devem ser levados em conta através de variáveis que definem o problema direto. Exemplos de problemas deste tipo são: problemas de mudança de fase, de soldagem, entre outros. Para solução deste tipo de problema inverso, deve-se primeiramente parametrizar a forma da fronteira.
- Problemas Inversos de controle ou design ótimo: Consiste em acoplar um controle ótimo para caracterização do experimento. Como na transferência de calor, a caracterização de problemas normalmente é não linear, qualquer otimização deve ser implementada com uma *priori* que os parâmetros buscados são conhecidos, com uma abordagem iterativa, onde a primeira

estimativa deve ser encontrada. Valores nominais destes parâmetros são necessários.

Vale salientar que um problema inverso pode envolver tanto estimação de parâmetros quanto de funções.

4.3.1. Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov

Neste trabalho foi utilizado o Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC) através do algoritmo *Metropolis-Hastings*, descritos no tópico a seguir, para o cálculo da distribuição *a posteriori* e para a estimativa dos parâmetros de interesse envolvidos.

O método de Monte Carlo é um método estatístico utilizado em simulações estocásticas, com diversas aplicações em áreas tais quais como a biologia, matemática e física. Este método envolve a geração de observações de alguma distribuição de probabilidades e então utiliza a amostra obtida para aproximar a função de interesse.

Para um entendimento do Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov faz-se necessário primeiramente introduzir o conceito de um processo estocástico. Um processo estocástico é uma coleção de variáveis aleatórias (dependentes do tempo) que evoluem ao longo do tempo de forma probabilística. Os valores assumidos por estas variáveis aleatórias em certo instante de tempo são chamados de estados. Sendo um processo Markoviano um processo estocástico, este se caracteriza por dado um estado presente, os estados passados e os estados futuros são independentes. A Cadeia de Markov é um processo estocástico onde para obter o estado futuro, só é necessário conhecer o estado presente e deve obedecer à seguinte condição (Garmeman e Lopes, 2006):

$$q(i, j) = q(i \rightarrow j) = q(P_{t+1} = a_j | P_t = a_i) \quad (4.22)$$

onde q é uma probabilidade transição, que indica a probabilidade de que o processo, estando no estado a_i mova-se para o estado a_j em um único passo.

O método de Monte Carlo via Cadeia de Markov faz com que seja possível obter uma grande amostra da distribuição *a posteriori* como também calcular estimativas amostrais das características desta distribuição através de técnicas de simulação iterativa.

De acordo com Ehlers (2003), para obter uma única distribuição de equilíbrio é necessário que a cadeia seja homogênea, sendo, portanto as probabilidades de transição invariantes de um estado para o outro; que a cadeia seja irredutível, ou seja, cada estado da cadeia poderia ser alcançado a partir de qualquer outro estado para um dado número finito de iterações; e por fim, que a cadeia seja aperiódica, isto é que não haja estados absorventes.

Desta maneira, para obter uma única distribuição estacionária, é necessário que o processo obedeça s seguinte condição:

$$p(i \rightarrow j)p_i(\mathbf{P} | \mathbf{Y}) = p(j \rightarrow i)p_j(\mathbf{P} | \mathbf{Y}) \quad (4.23)$$

sendo $p_i(\mathbf{P} | \mathbf{Y})$ e $p_j(\mathbf{P} | \mathbf{Y})$ as probabilidades dos estados distintos da distribuição de interesse.

À medida que o número de estados da cadeia de Markov aumenta, a cadeia tende a convergir para uma distribuição de equilíbrio. Sendo de grande importância a influência dos valores iniciais sob a cadeia de Markov, é bastante comum que os primeiros estados sejam descartados a fim de que sejam somente considerados aqueles estados que atingiram uma distribuição de equilíbrio. Os estados iniciais são considerados como estados de aquecimento.

A ideia do algoritmo de Metropolis-Hastings é basicamente gerar um valor de uma distribuição auxiliar aceitando-o apenas com certa probabilidade. Trabalhando da mesma maneira que os algoritmos de rejeição, o algoritmo de *Metropolis-Hastings* garante a convergência da cadeia de estados para uma distribuição de equilíbrio.

O funcionamento básico deste algoritmo é utilizar uma função de densidade de probabilidade auxiliar (normalmente a distribuição Gaussiana e a Uniforme são utilizadas em um processo de passeio aleatório), $q(\mathbf{P}^* | \mathbf{P}^{(t-1)})$, para gerar um novo valor candidato, \mathbf{P}^* . Estando a cadeia em um estado anterior, $\mathbf{P}^{(t-1)}$, o novo candidato será aceito se obedecer a razão de Hastings dada por:

$$\alpha(\mathbf{P}^{(t-1)}, \mathbf{P}^*) = \min \left[1, \frac{\pi(\mathbf{P}^* | \mathbf{Y})q(\mathbf{P}^{(t-1)} | \mathbf{P}^*)}{\pi(\mathbf{P}^{(t-1)} | \mathbf{Y})q(\mathbf{P}^* | \mathbf{P}^{(t-1)})} \right] \quad (4.24)$$

onde $\pi(\mathbf{P}^*|\mathbf{Y})$ é a distribuição *a posteriori* de interesse.

Faz-se necessário conhecer a distribuição *a posteriori* a menos de uma constante; uma vez que estamos trabalhando com razões entre densidades, a constante de normalização $\pi(\mathbf{Y})$ é cancelada na Eq. (4.18). Deve-se calcular a taxa de aceitação dos novos estados para atentar se a cadeia está permanecendo no mesmo estado por várias iterações. A Figura 4.2 detalha de forma esquemática os passos do algoritmo de Metropolis-Hastings (Ehlers, 2003).

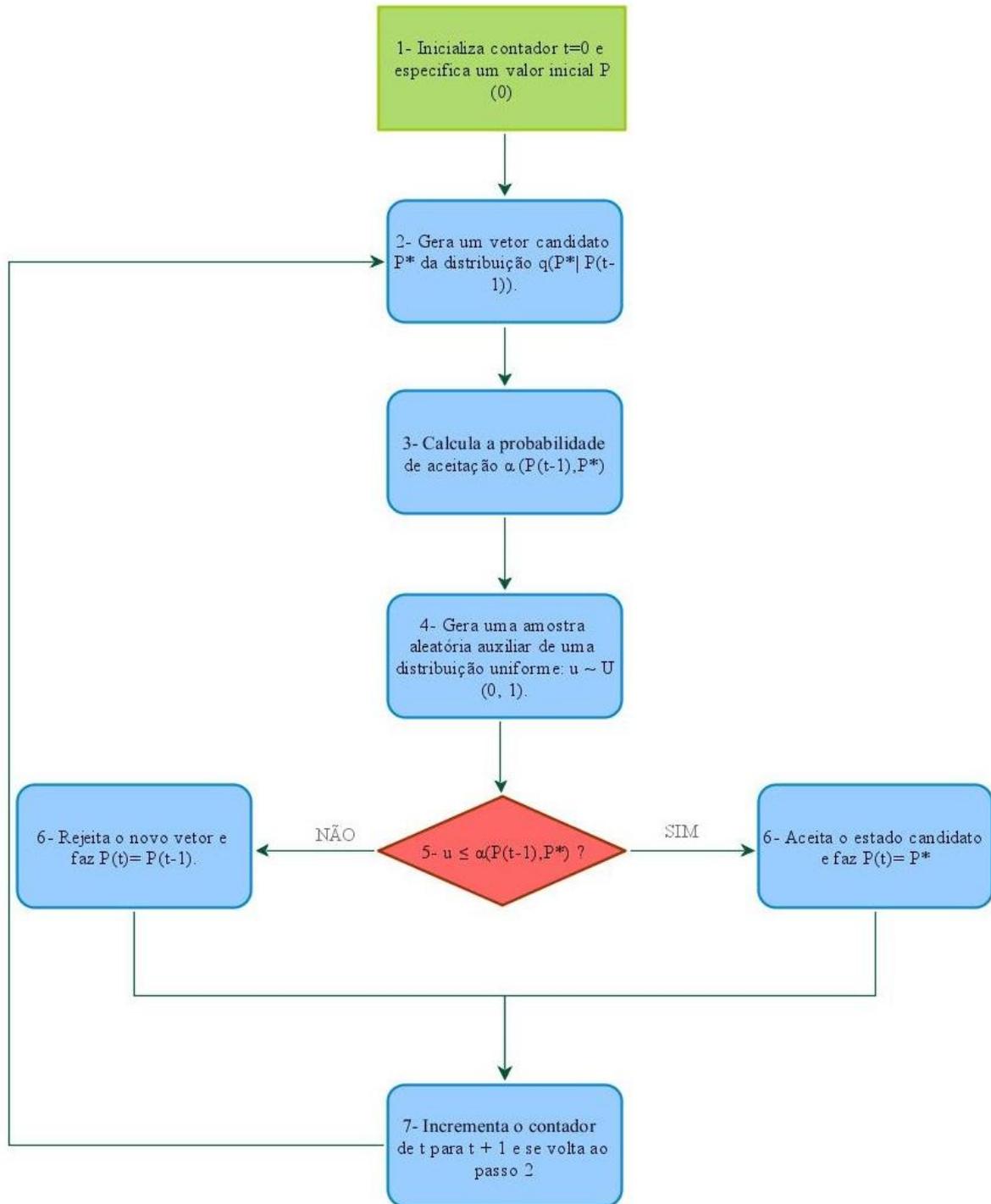


Figura 4.2: Fluxograma do Algoritmo de Metropolis-Hastings

Este algoritmo foi desenvolvido por Nicholas Metropolis *et al* (1953) e W. K. Hastings (1970) e é um método Monte Carlo bastante utilizado na física. Seu objetivo é determinar valores esperados de propriedades do sistema, que é simulado, através de uma média sobre uma amostra.

A variância da média, após serem descartados os estados de aquecimento, não é a variância da cadeia de Markov. A variância da média deve ser então calculada da seguinte maneira (Tan *et al.* 2006; Gamerman e Lopes, 2006):

$$\text{var}_{\text{média}} = \frac{\tau_{\text{corr}}}{s} \text{var}_{\text{cadeia}} \quad (4.25)$$

onde o termo $\frac{\tau_{\text{corr}}}{s}$ representa o número efetivo de amostras na cadeia que são independentes.

τ_{corr} é o tempo integrado de auto correlação entre as amostras, que representa o número de amostras correlacionadas entre duas amostras independentes e s é o número de estados da cadeia sem os estados de aquecimento.

A função de auto covariância das amostras da cadeia é definida como sendo (Tan *et al.* 2006; Gamerman e Lopes, 2006; Orlande, 2015):

$$C_{ff} = \text{cov} \left[f \left(P_j^{(r)} \right), f \left(P_j^{(r+k)} \right) \right] \quad (4.26)$$

Portanto, a função de auto covariância normalizada é dada por (Tan *et al.* 2006; Gamerman e Lopes, 2006; Orlande, 2015):

$$\rho_{ff}(k) = \frac{C_{ff}(k)}{C_{ff}(0)} \quad (4.27)$$

O tempo integrado de auto correlação é definido de acordo com a função normalizada de auto covariância por (Tan *et al.* 2006; Gamerman e Lopes, 2006; Orlande, 2015):

$$\tau_{\text{corr}} = 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \rho_{ff}(k) \quad (4.28)$$

onde, para o cálculo de τ_{corr} , o somatório presente na Eq. (4.28) precisa ser truncado em um número finito de termos. Como a função de auto covariância normalizada tende a zero à medida que as amostras aumentam, deve-se escolher o número de termos do somatório até que a função de auto covariância se aproxime de zero.

Os intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados deste trabalho (e mostrados no Capítulo VII) foram calculados com um nível de 99% de credibilidade. O intervalo de credibilidade das estimativas, que na estatística Bayesiana é um intervalo de probabilidade *a posteriori*, foram calculado a partir dos quantis (isto é, a partir de probabilidades acumulativas da amostra) através de uma função pronta do *Matlab*, chamada *quantile* que calcula os percentis desejados da amostra. O intervalo de credibilidade na estatística Bayesiana é utilizado para fins similares ao do intervalo de confiança da estatística frequentista. No capítulo VII são mostrados gráficos do intervalo de confiança das médias estimadas calculados com o desvio padrão da Eq. (4.25).

CAPÍTULO V

5. PROBLEMA FÍSICO, FORMULAÇÃO MATEMÁTICA E MÉTODO DE SOLUÇÃO DO PROBLEMA DIRETO

Este capítulo traz uma breve explicação sobre o que acontece em um transistor do tipo MOSFET, sobre as ligações interatômicas dos átomos de silício e qual o mecanismo que faz com que haja uma geração de calor dentro do transistor.

Serão apresentados os seguintes problemas físicos com suas respectivas formulações matemáticas:

- Problema 1: utilizado para verificação da solução com o MCDR e para o estudo da convergência da malha.
- Problema 2: envolve uma fonte de calor interna ao transistor.

Também serão apresentadas as equações que compõem as suas formulações matemáticas, as formulações adimensionais, bem como os parâmetros adimensionais que foram utilizados. O problema 2 apresenta duas variações de fonte de calor.

Por fim, descreve-se o método utilizado para a solução dos problemas diretos.

5.1. Entendimento do Problema Físico

A geometria do problema físico em questão consiste em um transistor do tipo metal-óxido-semicondutor, abreviado por MOSFET na língua inglesa (*Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor*). A aplicação de uma baixa tensão na porta do transistor é que controla a corrente entre a fonte e o dreno, que por sua vez, através do efeito Joule, aquece o dispositivo. O MOSFET normalmente possui uma fina camada de SiO_2 , que separa o contato metálico da porta do substrato de Si e é chamada de camada de inversão, sendo, portanto, o conjunto formado pelo contato metálico, pela camada de inversão e pelo semicondutor denominado de capacitor MOS (metal-óxido-semicondutor).

O problema físico consiste, portanto no aquecimento de um transistor do tipo MOSFET devido ao efeito Joule. Aquecimento local ou pontos quentes do tamanho de 10nm podem causar a falha do dispositivo (Zhang, 2007), diminuindo o seu tempo de vida útil. Sendo os transistores, dispositivos formados de materiais semicondutores e utilizados em praticamente todos os equipamentos eletrônicos que existem atualmente, faz-se necessário o entendimento de como ocorre a condução de corrente elétrica nestes materiais, que por sua vez dá origem à transferência de calor por condução nestes dispositivos.

Os materiais semicondutores são materiais cristalinos onde seus átomos se conectam através de ligações covalentes, isto é, compartilham um elétron em comum. Portanto, com o aumento de temperatura do material, rompe-se uma ligação covalente entre os átomos fazendo com que o elétron abandone a ligação e passe a circular livremente no interior do cristal, deixando naquele local uma lacuna.

Os transistores são formados basicamente de silício, que possui quatro elétrons em sua última camada de valência, que é dopado com impurezas, ou seja, com outros materiais que possuem um elétron a mais ou a menos em sua última camada de valência em relação ao silício. Esses materiais geralmente são o boro e o fósforo. Quando o silício é dopado com um material que possui um elétron a mais na sua camada de valência, tem-se um semicondutor do tipo N, enquanto se o mesmo é dopado com um material com um elétron a menos em sua camada de valência, tem-se um semicondutor do tipo P.

A dopagem dos semicondutores é realizada para que, na presença de uma tensão elétrica e a medida que a temperatura aumente, surjam portadores de carga elétrica, os elétrons que possuem carga negativa e as lacunas que possuem carga positiva. Sendo assim, a partir da dinâmica dos elétrons e das lacunas surge a presença de uma corrente elétrica no semicondutor, já que quando uma ligação covalente se rompe, o elétron livre ocupa o espaço livre da ligação entre o silício e o outro material dopagem, que por sua vez possui um elétron a menos na sua última camada. A Figura 5.1 apresenta esquematicamente o arranjo entre os átomos quando o semicondutor é dopado tipo N (Figura 5.1.a) e quando é dopado do tipo P (Figura 5.1.b)

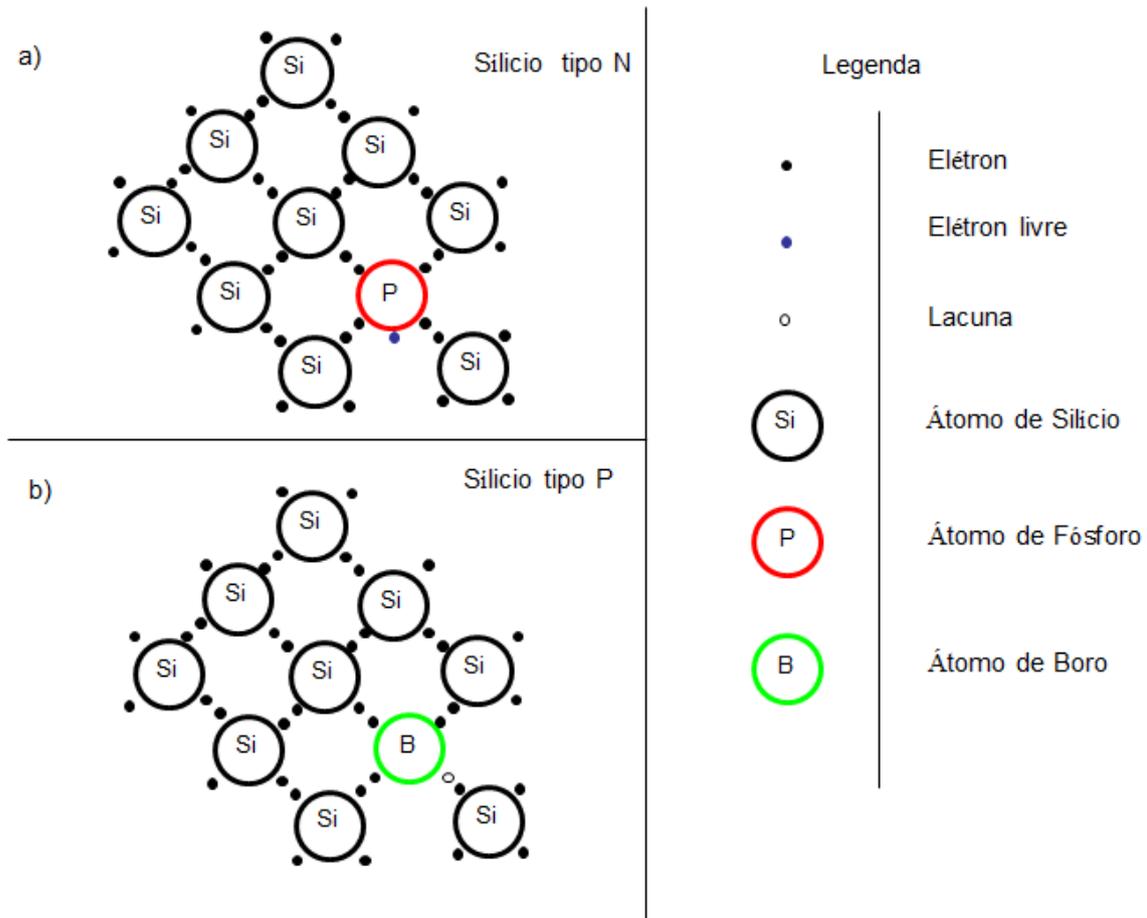


Figura 5.1.: Arranjo entre os átomos de um semicondutor dopado tipo N (Figura a) e dopado tipo P (Figura b).

Os principais processos dinâmicos dos portadores de carga elétrica são a criação de pares elétron-lacuna, a recombinação de pares e o movimento coletivo desses portadores (Rezende, 2004). O movimento coletivo das cargas resulta em uma corrente elétrica, que consiste no principal mecanismo de transmissão de informação nos dispositivos (Rezende, 2004).

O MOSFET, cuja geometria é apresentada na Figura 5.2, é normalmente composto de três materiais, sendo o silício (Si) o material do substrato, o alumínio o material dos contatos (dreno, porta e fonte), o dióxido de silício (SiO_2) como sendo a camada que separa o substrato do contato da porta. O objeto de estudo do nosso problema será um MOSFET com dimensões de $L=100\text{nm}$, $l=50\text{nm}$ e $1\mu\text{m}$ de espessura (ver Figura 5.3). A fim de considerarmos o problema bidimensional, desprezando a transferência de calor ao longo da espessura do MOSFET, devem ser utilizados tempos menores que 60 ps (Ghazanfarian e

Shomalli, 2012). Não será analisada a transferência de calor nas regiões do dreno, da fonte, do *gate* e nem da camada de óxido, sendo, portanto a geometria utilizada na formulação matemática do nosso problema apenas a do substrato do transistor.

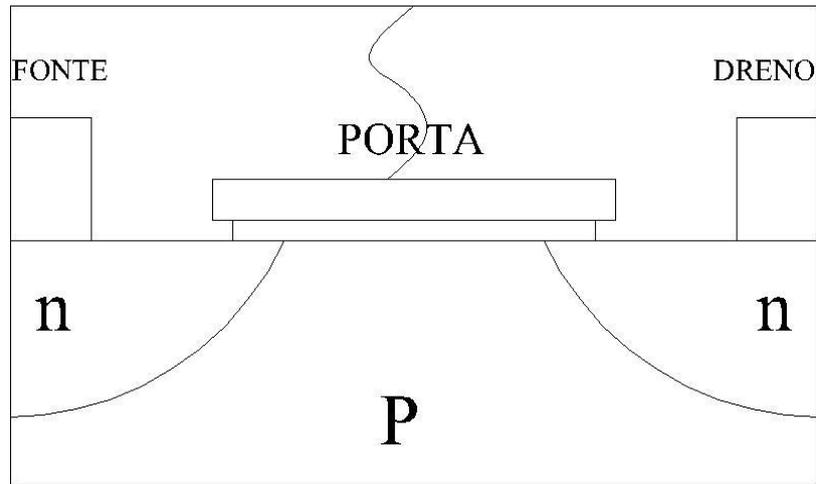


Figura 5.2: Transistor tipo MOSFET.

A geração de calor deve-se à corrente elétrica que passa da fonte para o dreno, onde o efeito Joule é dado por (Pop, 2010):

$$Q = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} + (R + G)(E_G + 3K_B T) \quad (5.1)$$

onde \mathbf{J} é o vetor densidade de corrente, \mathbf{E} é o vetor do campo elétrico, $(R + G)$ é a taxa não radiativa de recombinação, E_G é a banda de energia do semiconductor e K_B é a constante de Boltzmann.

Para termos de simplificação em alguns casos, Yang *et al.* (2002, 2005), Ghazanfarian e Shomalli (2012), Narsi *et al.* (2015), entre outros autores, desprezam o segundo termo do lado direito da Eq. (3.1), fazendo $Q_{\max} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}$. Segundo Chen *et al.* (2004), Yang *et al.* (2005) apud Taur *et al.* 1998, a taxa de geração de energia Q utilizada é de $Q_{\max} = 1 \times 10^{19} \text{ W} / \text{m}^3$ para um período típico de 10 ps.

5.2. Problema Físico e Formulação Matemática do Problema 1

Neste problema, que serviu para verificação da solução com o MCDR no transistor e para o estudo da convergência da malha, o caso estudado envolve um comprimento de $L_h=10\text{nm}$, na fronteira superior do transistor que muda repentinamente para uma temperatura T_h . O mesmo caso é também estudado por Yang *et al* (2005) e Ghazanfarian e Abbassi (2012). As demais fronteiras e o restante do domínio encontram-se na temperatura T_0 .

A Figura 5.3 apresenta um esquema do problema físico tratado neste caso.

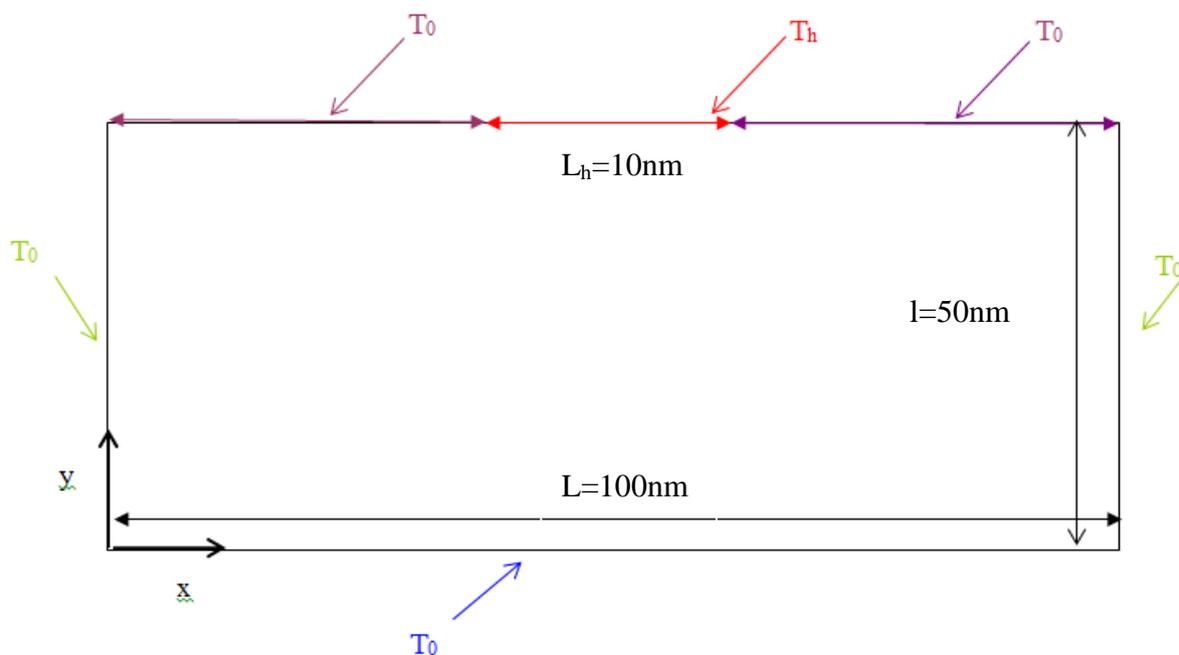


Figura 5.3: Esquema do problema físico abordado para a verificação da solução do MCDR obtida através do Comsol

O problema a ser tratado aqui é idêntico ao estudado por Ghazanfarian e Abbassi (2012). Trata-se de um modelo bidimensional de condução de calor através do modelo de duplo retardo no transistor onde a equação governante do problema é definida por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \frac{k}{C} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \tau_r \frac{k}{C} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (5.2)$$

onde $k = (C|\nu|\Lambda)$ é a condutividade térmica do meio, sendo $|\nu|$ e Λ a velocidade e o livre caminho médio dos fônons, respectivamente. Considera-se que as propriedades termofísicas do material do transistor são homogêneas e isotrópicas. Para este problema, tem-se que $\tau_q > \tau_r$, ou seja, o gradiente de temperatura precede o vetor fluxo de calor por condução.

Para uma escala espacial tão pequena quanto esta, o equilíbrio termodinâmico local não é mais válido. Sendo assim, não se pode definir temperatura da mesma maneira como é definida na macroescala, chamada de temperatura equivalente ou temperatura de equilíbrio. Nesta escala é preciso levar em conta a difusão dos fônons nas fronteiras do domínio, cuja temperatura de emissão é diferente da temperatura da parede, causando um salto de temperatura nestas interfaces. Este salto de temperatura também foi observado por Chen (2001, 2002) e Yang *et al.* (2005) através do modelo balístico difusivo. No caso de filmes finos dielétricos, a distribuição efetiva de temperatura não pode ser descrita pela teoria da difusão de Fourier utilizando o conceito de temperatura de equilíbrio sem considerar os saltos de temperaturas nas fronteiras, (Zhang, 2007). Neste caso, aplicamos a condição de salto de temperatura, descrita pela teoria cinética, nas fronteiras dada por (Lee *et al.*, 2016):

$$T_s - T_w = -d_1 \Lambda \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right)_\Omega \quad (5.3)$$

onde $d_1=0,061$ é um coeficiente de ajuste utilizado por Ghazanfarian e Abbassi (2012) para ajustar a solução do seu problema obtido pelo modelo de condução de duplo retardo com a solução do problema resolvido por Yang *et al.* (2005) pelo modelo balístico difusivo.

O problema é formulado com uma condição de contorno de salto de temperatura de primeira ordem (Ghazanfarian e Abbassi (2009), Ghazanfarian e Shomalli (2012); Narsi (2015)).

A utilização de uma condição de contorno que simule a difusão dos fônons na parede justifica-se pelo fato da temperatura de emissão dos fônons nas fronteiras ser diferente da temperatura na parede como pode ser observado pelos trabalhos de Chen (2001) e Yang *et al.* (2005) através do modelo balístico difusivo.

Foram utilizados os seguintes parâmetros adimensionais, definidos através de:

$$T^* = \frac{T - T_0}{T_h - T_0}, \quad t^* = \frac{t \alpha_{ref}}{L_h^2}, \quad \tau_T^* = \frac{\tau_T}{\tau_{Tref}}, \quad \tau_q^* = \frac{\tau_q}{\tau_{qref}}, \quad x^* = \frac{x}{L_h}, \quad y^* = \frac{y}{L_h} \quad (5.4)$$

$$k^* = \frac{k}{k_{ref}}, \quad C^* = \frac{C}{C_{ref}}, \quad \alpha^* = \frac{\alpha}{\alpha_{ref}}, \quad Kn = \frac{\Lambda}{L_h}, \quad q^* = \frac{\mathbf{q}}{C|\mathbf{v}|T_0}$$

onde, L_h é o comprimento característico do transistor que neste problema será dado como àquele referente à região de aquecimento, T_0 é a temperatura de referência dada pela temperatura inicial, Kn é o número de Knudsen, T_h é a temperatura da parede do substrato do transistor na região do aquecedor e τ_q e τ_T são os tempos de relaxação do fluxo de calor e do gradiente de temperatura respectivamente. A sigla *ref.* indica que estes parâmetros pertencem a um material conhecido de referência que neste trabalho foi tomado como o

silício e $\tau_{Tref} = \tau_{qref} = \frac{L_h^2}{\alpha_{ref}}$.

Adimensionalizando, portanto, as Eqs. (5.2) e (5.3) com os parâmetros definidos em (5.4), temos a equação do MCDR e a condição de contorno para este problema dado pelas seguintes equações:

$$\frac{1}{\alpha^*} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{\tau_q^*}{\alpha^*} \frac{\partial^2 T^*}{\partial t^{*2}} = \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) + \tau_T^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) \quad (5.5)$$

$$T_s^* - T_w^* = -d_1 Kn \left(\frac{\partial T^*}{\partial \mathbf{n}^*} \right)_{\Omega} \quad (5.6)$$

A condição inicial adimensional do problema é dada por Eq. (5.7).

$$T^*(x^*, y^*, 0) = 0 \quad (5.7)$$

Além do fato de que a adimensionalização de um problema torna-o mais simples de ser interpretado já que reduz o número de parâmetros e generaliza a sua solução, simplificando análises e simulações, a escolha destes parâmetros adimensionais teve como propósito arranjar os mesmo de uma forma que aparecessem na equação governante de maneira mais independente para facilitar a sua estimação via problemas inversos.

As Equações (5.8-5.16), abaixo, resumem a formulação matemática do problema.

$$\frac{1}{\alpha^*} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{\tau_q^*}{\alpha^*} \frac{\partial^2 T^*}{\partial t^{*2}} = \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) + \tau_T^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) \quad (5.8)$$

em toda região para $t^* > 0$

$$T^* - T_0^* = -d_1 Kn \left(\frac{\partial T^*}{\partial y^*} \right) \text{ em } y^* = 0 \text{ e } 0 < x^* < L^* \quad (5.9)$$

$$T^* - T_0^* = d_1 Kn \left(\frac{\partial T^*}{\partial y^*} \right) \text{ em } y^* = l^* \text{ e } 0 < x^* < \frac{L^* - L_h^*}{2} \quad (5.10)$$

$$T^* - T_h^* = d_1 Kn \left(\frac{\partial T^*}{\partial y^*} \right) \text{ em } y^* = l^* \text{ e } \frac{L^* - L_h^*}{2} < x^* < \frac{L^* + L_h^*}{2} \quad (5.11)$$

$$T^* - T_0^* = d_1 Kn \left(\frac{\partial T^*}{\partial y^*} \right) \text{ em } y^* = l^* \text{ e } \frac{L^* + L_h^*}{2} < x^* < L^* \quad (5.12)$$

$$T^* - T_0^* = -d_1 Kn \left(\frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) \text{ em } x^* = 0 \text{ e } 0 < y^* < l^* \quad (5.13)$$

$$T^* - T_0^* = d_1 Kn \left(\frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) \text{ em } x^* = L^* \text{ e } 0 < y^* < l^* \quad (5.14)$$

$$T^*(x^*, y^*, 0) = 0 \text{ em toda região para } t^* = 0 \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = 0 \text{ em toda região para } t^* = 0 \quad (5.16)$$

5.3. Problema Físico e Formulação Matemática do Problema 2

A geometria deste problema é idêntica ao anterior. Contudo, ao invés de uma das fronteiras mudar repentinamente de temperatura, este problema possui uma fonte de geração de calor interna. O problema físico está representado pela Figura 5.4. Um sensor é suposto localizado no ponto $P_4(5,5)$ conforme indicado na Figura 5.4. A temperatura adimensional é calculada por $T^* = \frac{T - T_0}{T_0}$. Dois tipos de fonte de calor foram utilizados no problema direto e

são apresentados nas Figuras 5.5 e 5.6, sendo representadas por, $Q_1 = \begin{cases} \left(\frac{Q_{\max}}{10}\right)t & \text{para } 0 \leq t < 10\text{ps} \\ 0 & \text{para } 10\text{ps} \leq t \end{cases}$ e por $Q_2(t) = \{0.5 + 0.5[\tanh(12t)]\} Q_{\max}$, respectivamente, onde $Q_{\max} = 10^{19} \text{ W/m}^3$.

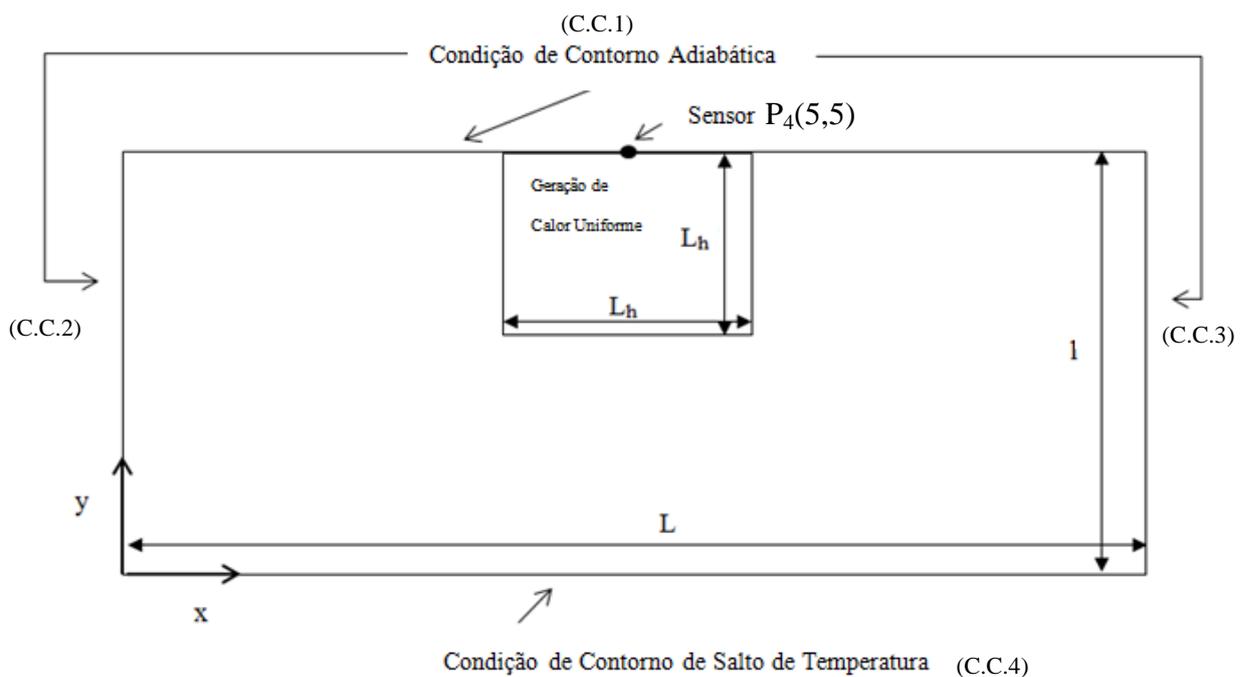


Figura 5.4: Esquema do problema físico abordado.

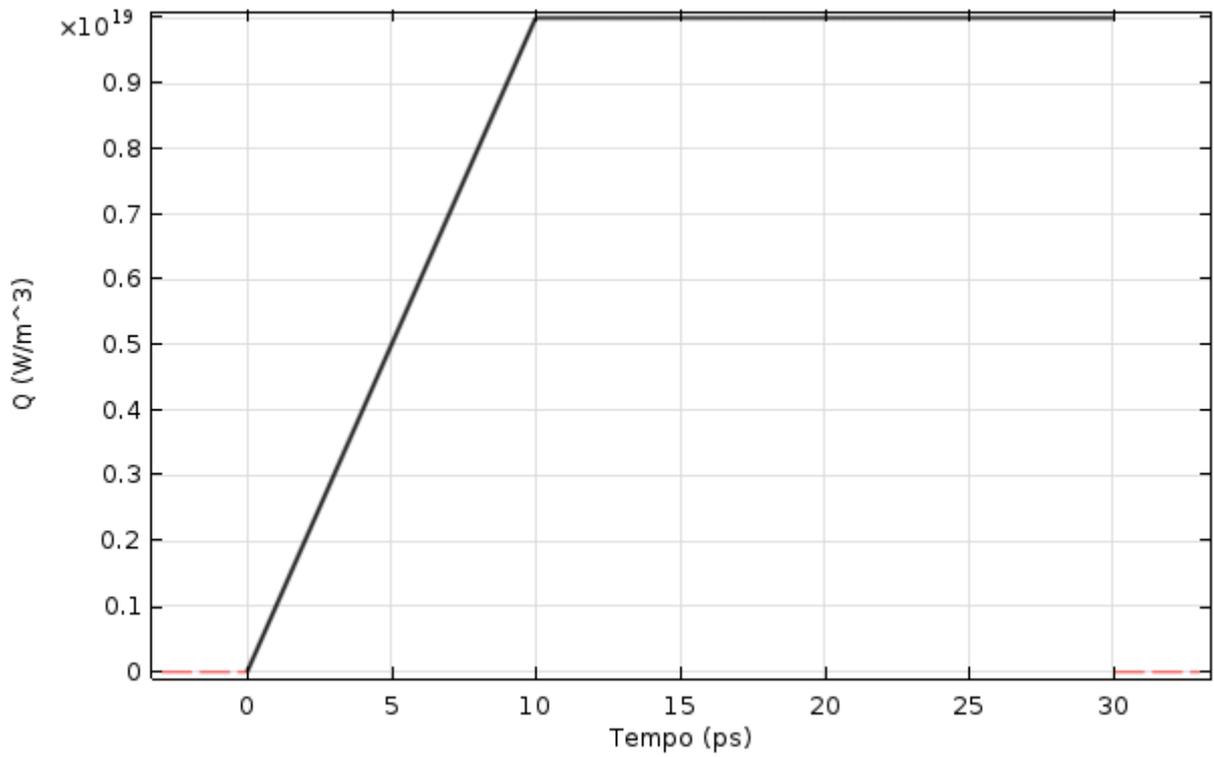


Figura 5.5: Fonte de Calor – Tipo 1 - $Q_1 = \begin{cases} \left(\frac{Q_{\max}}{10}\right)t & \text{para } 0 \leq t < 10\text{ps} \\ 0 & \text{para } 10\text{ps} \leq t \end{cases}$.

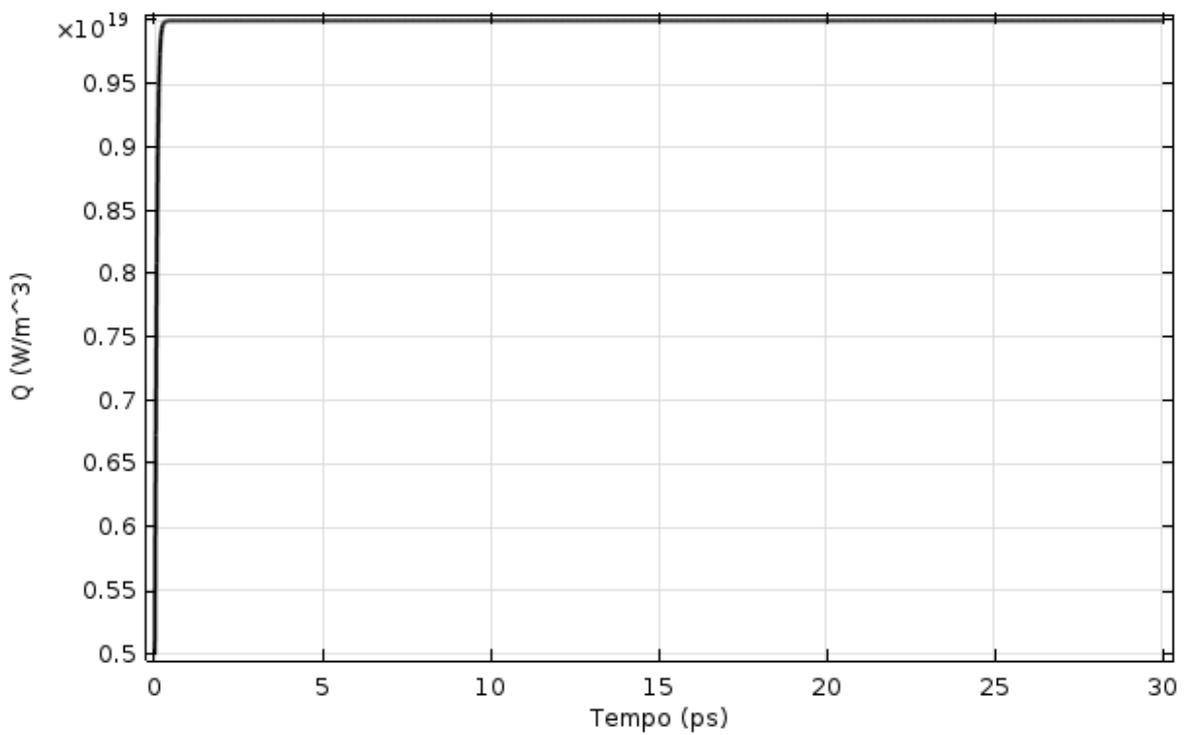


Figura 5.6 Fonte de Calor – Tipo 2 - $Q_2(t) = \{0.5 + 0.5[(\tanh(12t))]\} Q_{\max}$

Trata-se de um modelo bidimensional de condução de calor através do modelo de duplo retardo. As condições de contorno C.C.1, C.C.2 e C.C.3 são adiabáticas, enquanto na C.C.4 existe um salto de temperatura como é indicado na Figura 5.4. Considera-se que as propriedades termofísicas do material do transistor são homogêneas e isotrópicas.

A equação de salto de temperatura proposta por Ghazanfarian e Abbassi (2012), Lee *et al.* (2016) é dada pela Eq. (5.3). Contudo, neste trabalho foi modelado utilizando outro tipo de condição de contorno, envolvendo um salto de temperatura, para simular a difusão dos fônons na parede sujeita ao fluxo de calor de acordo com o MCDR dada por:

$$\frac{k^*}{d_1 Kn} \frac{\partial T^*}{\partial \mathbf{n}^*} + \frac{1}{d_1 Kn} T^* + k^* \tau_T^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial T^*}{\partial \mathbf{n}^*} \right) + \tau_q^* \frac{1}{d_1 Kn} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{1}{d_1 Kn} T_w^* \quad (5.17)$$

O desenvolvimento da Eq. (5.17), que é uma equação do terceiro tipo envolvendo o MDCR pode ser encontrado no Apêndice II.

Os parâmetros adimensionais foram os mesmos utilizados no Problema 1, além da fonte de calor adimensional, dada por: $Q^* = \frac{QL_h^2}{k_{ref} T_0}$.

Formulação Matemática Adimensional

A formulação matemática adimensional para o caso tratado neste problema é dada pelas equações:

$$\frac{1}{\alpha^*} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{\tau_q^*}{\alpha^*} \frac{\partial^2 T^*}{\partial t^{*2}} = \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) + \tau_T^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) + \frac{Q^*}{k^*} + \frac{\tau_q^*}{k^*} \frac{\partial Q^*}{\partial t^*} \quad (5.18)$$

em toda região para $t^* > 0$

$$\frac{\partial T^*}{\partial x^*} + \tau_T^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) = 0 \text{ em } x^* = 0, 0 \leq y^* \leq l^* \text{ para } t^* > 0 \quad (5.19)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial x^*} + \tau_T^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) = 0 \text{ em } x^* = L^*, 0 \leq y^* \leq l^* \text{ para } t^* > 0 \quad (5.20)$$

$$\frac{k^*}{d_1 Kn} \frac{\partial T^*}{\partial \mathbf{n}^*} + \frac{1}{d_1 Kn} T^* + k^* \tau_T^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial T^*}{\partial \mathbf{n}^*} \right) + \tau_q^* \frac{1}{d_1 Kn} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{1}{d_1 Kn} T_w^* \quad (5.21)$$

em $y^*=0$ e $0 < x^* < L^*$ para $t^* > 0$

$$\frac{\partial T^*}{\partial y^*} + \tau_T^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial T^*}{\partial y^*} \right) = 0 \quad \text{em } y^* = l^*, 0 \leq x^* \leq L^* \text{ para } t^* > 0 \quad (5.22)$$

$$T^*(x^*, y^*, 0) = 0 \quad \text{em toda região para } t^* = 0 \quad (5.23)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = 0 \quad \text{em toda região para } t^* = 0 \quad (5.24)$$

O desenvolvimento das Eqs. (5.19), (5.20) e (5.22) pode ser encontrado no Apêndice III.

5.4. Método de Solução do Problema Direto

A solução do problema definido pelas Eqs. (5.18 – 5.24) foi realizada com o uso da plataforma computacional COMSOL *Multiphysics* (COMSOL INC., BURLINGTON, MA), versão 5.2. O software permite que o usuário desenhe a geometria do seu problema e associe os fenômenos físicos que ocorrem no mesmo. O COMSOL é um programa que possui diversos módulos referentes a fenômenos físicos contendo suas respectivas equações diferenciais, parciais ou ordinárias e utiliza o método dos elementos finitos. O método dos elementos finitos considera a região de solução do problema em questão como sendo formada por pequenos elementos que estão interligados entre si. Portanto, a região de estudo é modelada ou aproximada por um conjunto de elementos discretos pré-definidos. O COMSOL possui um módulo de transferência de calor apenas para o modelo de Fourier. Portanto, para o problema em questão foi preciso utilizar uma interface que contém uma equação diferencial parcial mais geral, onde o usuário pode definir o problema.

Logo após o desenho da geometria e associação da equação governante, foram definidas as condições de contorno para o problema e por fim a geração da malha. O software possui diversas opções de malhas pré-definidas (dependendo da física ou do material) como o tamanho dos elementos também podem ser definido pelo usuário. Neste trabalho, fizemos uso

das malhas pré-definidas do COMSOL, da categoria para semicondutores com elementos triangulares. Para a solução do passo de tempo utilizamos o método BDF (*backward differentiation formula*) que é um método implícito de integração numérica. O *solver* utilizado foi o MUMPS (*Multifrontal Massively Parallel sparse direct Solver*).

As propriedades do Si, que também foi tomado como material de referência, utilizados na solução do problema direto, no cálculo dos coeficientes de sensibilidade e na solução do problema inverso apresentadas no Capítulo VI e VII encontram-se na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Propriedades do Si (Taur, *et al.* 1998; Yang, *et al.* 2005; Ghazanfarian e Abbassi, 2012) , do SiO2 (Goodson e Flik, 1992)

Material	$\tau_q (ps)$	$\tau_T (ps)$	$C (J m^{-3} K^{-1})$	$ \nu (ms^{-1})$	$k (W m^{-1} K^{-1})$	$\alpha (m^2 / s)$	$\Lambda (nm)$
Si	33.33	1.66	1.5×10^6	3000	148	1×10^{-4}	100

Os demais parâmetros utilizados neste trabalho para solução dos problemas direto e inverso encontram-se resumidos na Tabela 5.2, onde Lh é o comprimento característico do problema.

Tabela 5.2: Parâmetros utilizados (Taur, *et al.* 1998; Yang, *et al.* 2005; Ghazanfarian e Abbassi, 2012) , do SiO2 (Goodson e Flik, 1992)

$L_h (nm)$	$L (nm)$	$l (nm)$	Kn	$Q_{max} (W / m^3)$	d_1
10	50	100	10	1×10^{19}	0.061

CAPÍTULO VI

6. ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA E VERIFICAÇÃO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA

Este capítulo apresenta a análise da convergência da malha espacial e da discretização temporal utilizada bem como a verificação da solução numérica obtida por elementos finitos do problema direto de condução de calor através do MCDR obtida pelo COMSOL, com a solução analítica obtida com método de Transformada de Laplace e separação de variáveis apresentada em Ghazanfarian e Abbassi (2012). Os resultados mostrados neste Capítulo estão representados em função do parâmetro adimensional de tempo utilizado em Ghazanfarian e Abbassi (2012) e Yang *et al* (2005) para facilitar a comparação dos dados.

6.1. Análise de Convergência da solução numérica do problema direto obtida através do COMSOL

Para a análise de convergência da malha foi utilizado um computador com as seguintes configurações: CPU Intel Core I7-2600, com sistema operacional de 64 Bits, com frequência de processamento de 3.40GHz e 8GB de memória RAM instalada

Foi realizada a análise de convergência da malha espacial analisando o aumento de temperatura adimensional em determinados pontos com malhas espaciais pré-definidas pelo Comsol 5.2, para o caso em que $Kn=10$, $Kn=0.1$ e $Kn=1$. Porém só será detalhada aqui a análise do caso $Kn=10$. Fazendo a escolha da malha refinada pelo usuário, foi possível calibrar a malha para a opção *semiconductor* oferecida pelo Comsol 5.2. Analisou-se o aumento de temperatura nos pontos $P_2(5,2.5)$, $P_3(5,4.5)$ e $P_4(5,5)$ em coordenadas adimensionais da geometria do problema (apresentados na Figura 6.1) discretizando a malha com diferentes refinamentos. Para tanto, dividimos o domínio em duas regiões onde a região 2 é a região próximo ao aquecedor no Problema 1, enquanto que no Problema 2 refere-se a região onde ocorre a geração de energia interna, como indica a Figura 5.4 e o restante do domínio é chamado de região 1.

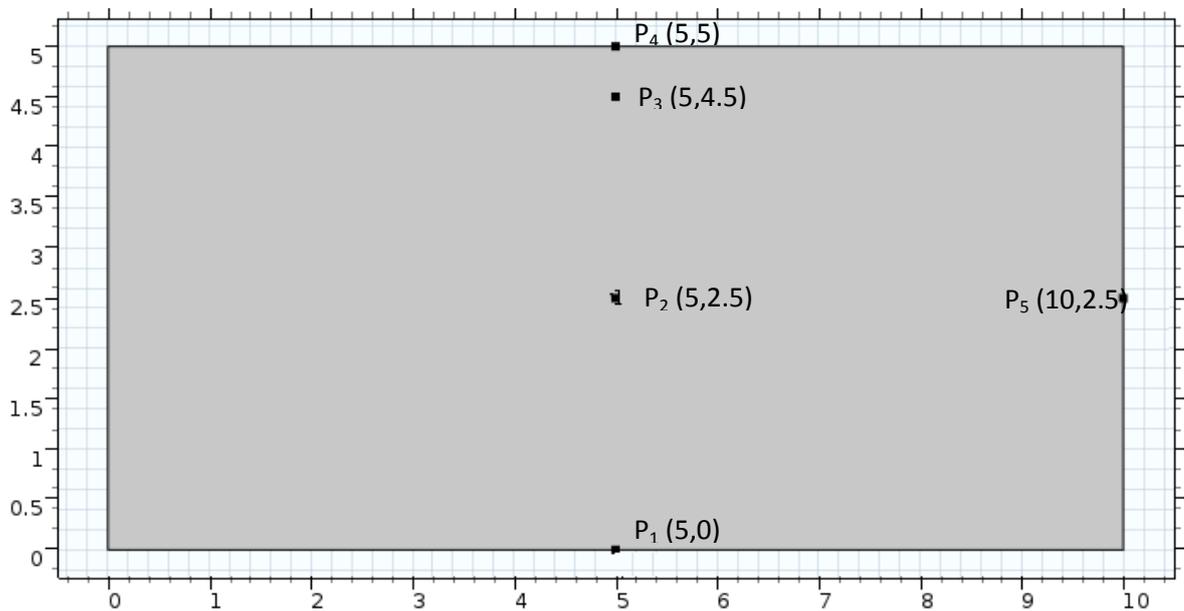


Figura 6.1: Indicação dos pontos P_1 , P_2 , P_3 , P_4 e P_5 na geometria do problema

A malha espacial no Comsol é discretizada por elementos finitos possuindo as configurações de parâmetros, mostradas na Tabela 6.1, para as malhas pré-definidas utilizadas neste trabalho. O tamanho máximo do elemento e o tamanho mínimo do elemento seguem a mesma unidade pré-definida pelo usuário no Comsol, neste caso os valores abaixo na Tabela 6.1 são adimensionais. Foram utilizadas malhas com elementos triangulares e atentou-se também para o uso de uma malha com tamanho do elemento menor que o comprimento característico do problema para cada número de Knudsen analisado.

Tabela 6.1: Malhas pré-definidas pelo Comsol para discretização por elementos finitos

Tamanho do Elemento	Tamanho máximo do elemento	Tamanho mínimo do elemento
Extremamente fina (a)	0.004	8e-4
Extra fina (b)	0.01	0.001
Mais fina (c)	0.02	0.004
Fina (d)	0.067	0.01
Normal (e)	0.13	0.02

A Tabela 6.2 apresenta 5 malhas com os seus devidos refinamentos escolhido para as duas regiões, o tempo de execução do programa e a temperaturas adimensional alcançada. no tempo $t^* = 9.8$, de acordo com a adimensionalização da Eq.(5.4). Utilizamos o problema com $Kn=10$ e um passo de $\Delta t^* = 0.1$. As Figuras das malhas da Tabela 6.2 podem ser encontradas no Apêndice I. As temperaturas adimensionais foram tomadas no tempo $t^* = 9.8$. Para os resultados da Tabela 6.2 utilizou-se um passo de tempo $\Delta t^* = 0.1$.

A análise de convergência iniciou-se utilizando a malha (e) para região 1 e variou-se a discretização da região 2 de acordo com a Tabela 6.2, tornando-as cada vez mais refinadas. A escolha de refinar apenas a região 2 deveu-se ao fato de que em ambos os problemas tratados neste trabalho, citados no Capítulo V, o aumento de temperatura nesta região é maior; e no problema 2 será a região onde estará localizado o sensor para a medição de temperatura utilizada no problema inverso. Sendo assim, esta região exige uma maior atenção.

A Tabela 6.2 revela que para o ponto o P_2 a convergência foi alcançada a partir do refinamento da malha 3 à malha 5 e que para os pontos P_3 e P_4 a convergência foi alcançada na segunda casa decimal também a partir do refinamento da malha 3 à malha 5. A Figura 6.2 apresenta o a discrepância entre as temperaturas adimensionais das malhas em relação ao número de elementos de cada malha.

Os resultados da Tabela 6.2 mostraram que o tempo de execução aumentou à medida que a discretização da região 2 foi refinada e que o desvio de temperatura de uma

malha para a outra é muito pequeno, não compensando portanto, utilizar uma malha mais refinada. Neste contexto, a malha 3 foi escolhida para solução do problema direto.

Tabela 6.2: Resultados obtidos alterando o refinamento da região 2

Malha	Região 1	Região 2	Temperatura Adimensional			Número de Elementos da malha	Tempo de Execução
			P ₂	P ₃	P ₄		
1	(e)	(e)	0.009	0.341	0.586	8143	9
2	(e)	(d)	0.009	0.338	0.583	8515	6
3	(e)	(c)	0.008	0.337	0.583	13059	11
4	(e)	(b)	0.008	0.337	0.583	28387	27
5	(e)	(a)	0.008	0.337	0.583	227749	154

Analisou-se o comportamento da curva de aumento de temperatura do ponto P₄ com a malha 3 alterando o passo de tempo para 1, 0.01 e 0.001 obtendo-se um custo computacional de 8, 57s e 787s respectivamente. Sendo assim, escolheu-se o passo de tempo de 0.1.

As figuras 6.2, 6.3 e 6.4 apresentam o aumento de temperatura ao longo do tempo dos pontos P₁, P₂, P₃ e P₄ e P₅ tomados na linha central do dispositivo para o problema tratado neste trabalho, para Kn=0.1, Kn=1 e Kn=10 respectivamente. A fim de realizar uma comparação com os resultados obtidos em Ghazanfarian e Abbassi (2012) e Yang *et al.* (2005), os resultados nos próximos gráficos deste Capítulo são mostrados em função do tempo adimensional, $t^* = \frac{t}{\tau_q}$ utilizados pelos mesmos.

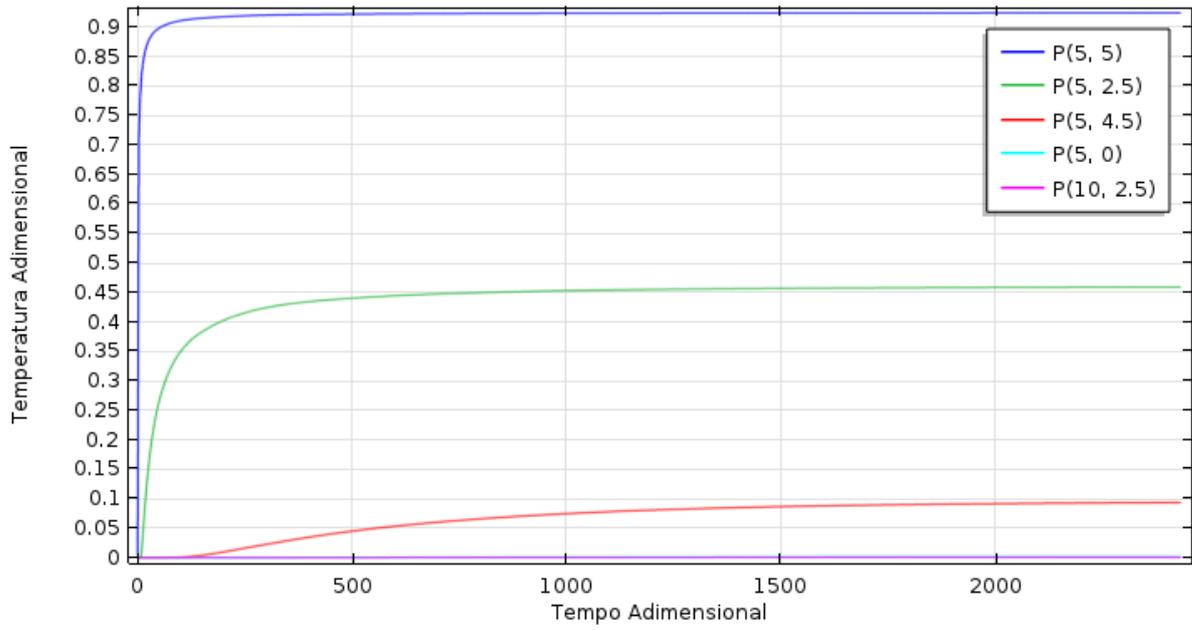


Figura 6.2: Temperatura ao longo do tempo para os pontos P_1 , P_2 , P_3 , P_4 e P_5 no caso de $Kn=0.1$

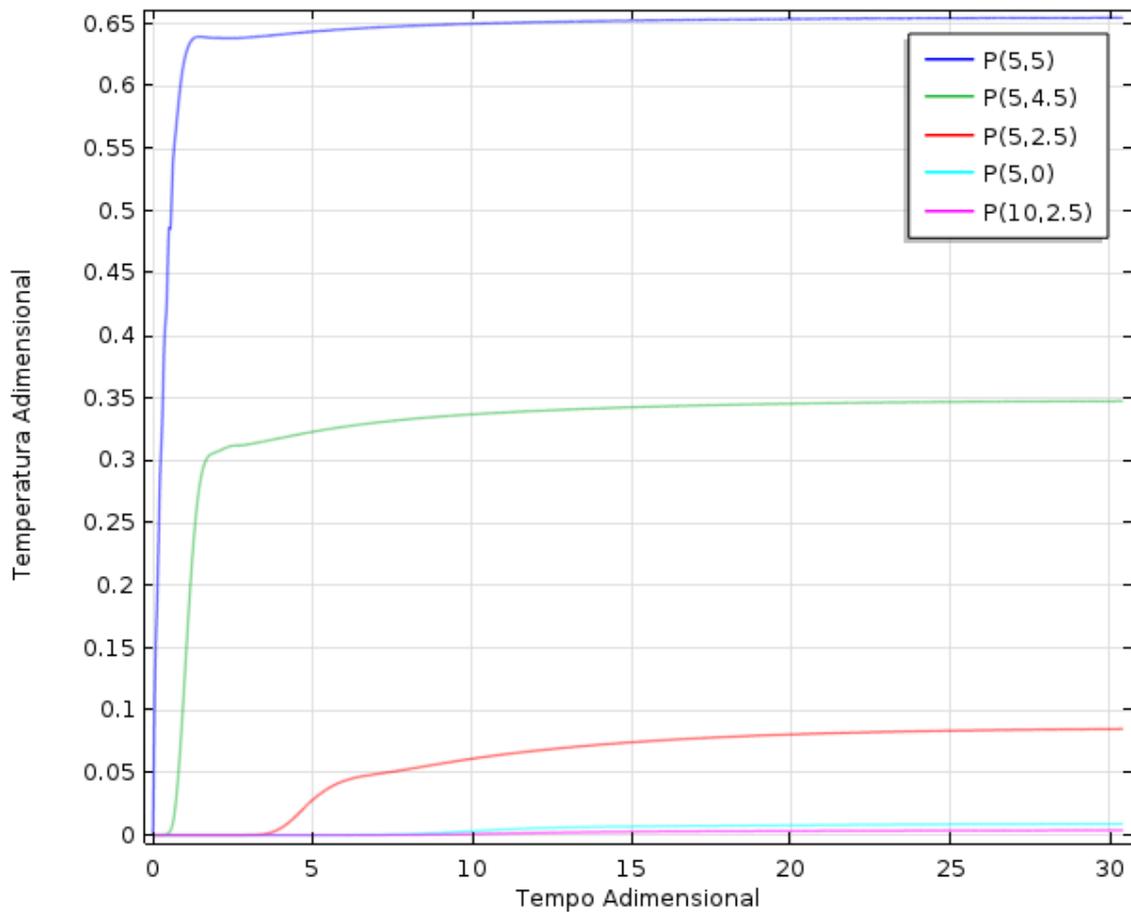


Figura 6.3: Temperatura ao longo do tempo para os pontos P_1 , P_2 , P_3 , P_4 e P_5 no caso de $Kn=1$

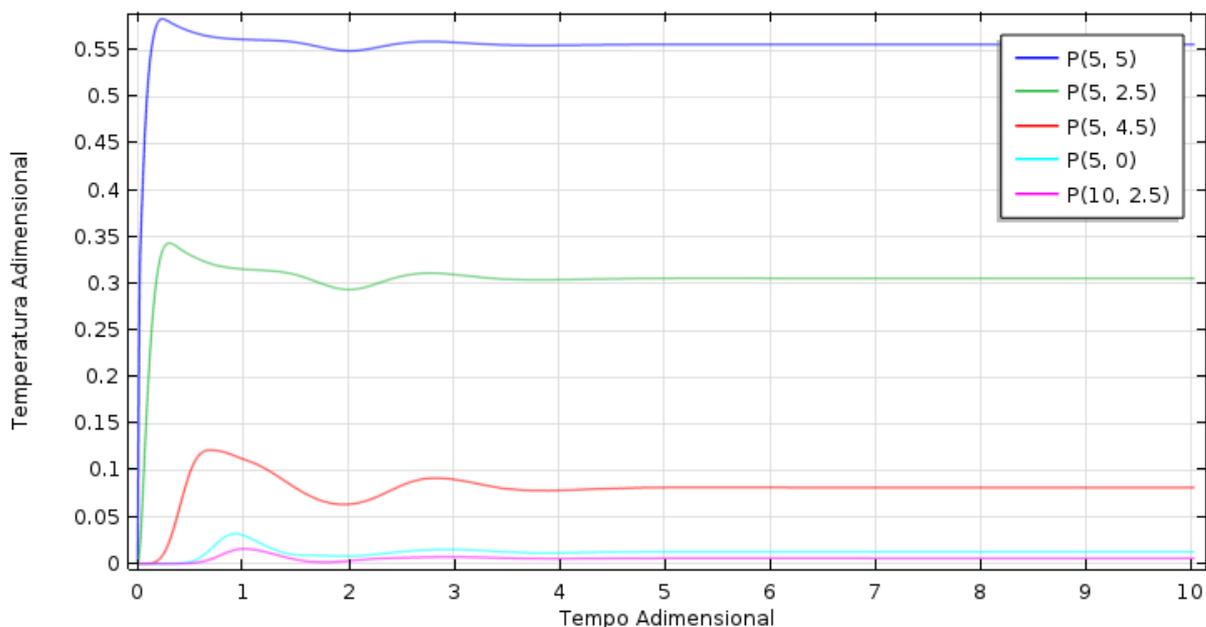


Figura 6.4: Temperatura ao longo do tempo para os pontos P_1 , P_2 , P_3 , P_4 e P_5 no caso de $Kn=10$

Analisando as Figuras 6.2, 6.3 e 6.4 foi possível identificar que o regime estacionário só é alcançado em torno do tempo adimensional 1700, 25 e 5.5 respectivamente (de acordo com a adimensionalização utilizada nos artigos de Ghazanfarian e Abbassi 2012 e Yang *et al.* 2005). As pequenas oscilações observadas nas curvas da Figuras 6.4 e que acentuam-se ainda mais na Figura 6.5 é devido à reflexão dos fônons nas paredes do transistor que aumenta à medida que o número de Knudsen aumenta.

6.2. Verificação do Problema Direto

O problema foi resolvido primeiramente com os mesmos parâmetros adimensionais utilizados em Ghazanfarian e Abbassi (2012) e a solução obtida neste trabalho para o MCDR bidimensional resolvida no software COMSOL, através de elementos finitos foi verificada com a solução analítica, resolvida através da Transformada de Laplace, apresentada em Ghazanfarian e Abbassi (2012) para diferentes números de Knudsen e para tempos diferentes.

As Figuras 6.5, 6.6 e 6.7 mostram esta verificação para $Kn=0.1$; 1 e 10 respectivamente. A verificação abaixo mostra uma boa concordância da solução numérica deste trabalho com a solução analítica por Transformada de Laplace apresentada em

Ghazanfarian e Abbassi (2012) para todos os números de Knudsen em todos os tempos, apresentando apenas um desvio em $Kn=10$ em $t^* = 0.1$ na Figura 6.7. Os dados da solução analítica de Ghazanfarian e Abbassi (2012) presentes nas Figuras 6.5 – 6.7 foram obtidos através da plataforma Grapher que possibilita obtenção de pontos sob uma curva, que é feita manualmente pelo usuário, estando, portanto sujeitos a erros na sua captação.

Fazendo uma comparação da figura 6.5 e 6.7 percebe-se que com o aumento do número de Knudsen, as características de onda do MCDR aumentam enquanto as características difusivas tornam-se mais fracas. Além disto, observando as Figuras 6.5, 6.6 e 6.7 percebe-se que a propagação de calor dentro do sólido torna-se mais rápida com o aumento do número de Knudsen, isto pode ser visto quando comparamos a penetração da onda de calor nos três gráficos para um mesmo tempo adimensional.

Outro ponto que se torna evidente na Figura 6.7, é que a propagação de calor dentro do domínio é mais rápida para $t^* = 1$ do que para $t^* = 10$. Isto indica o comportamento de onda que reflete diversas vezes dentro do domínio antes de atingir o regime estacionário. O mesmo comportamento não é encontrado nas Figuras 6.5 e 6.6.

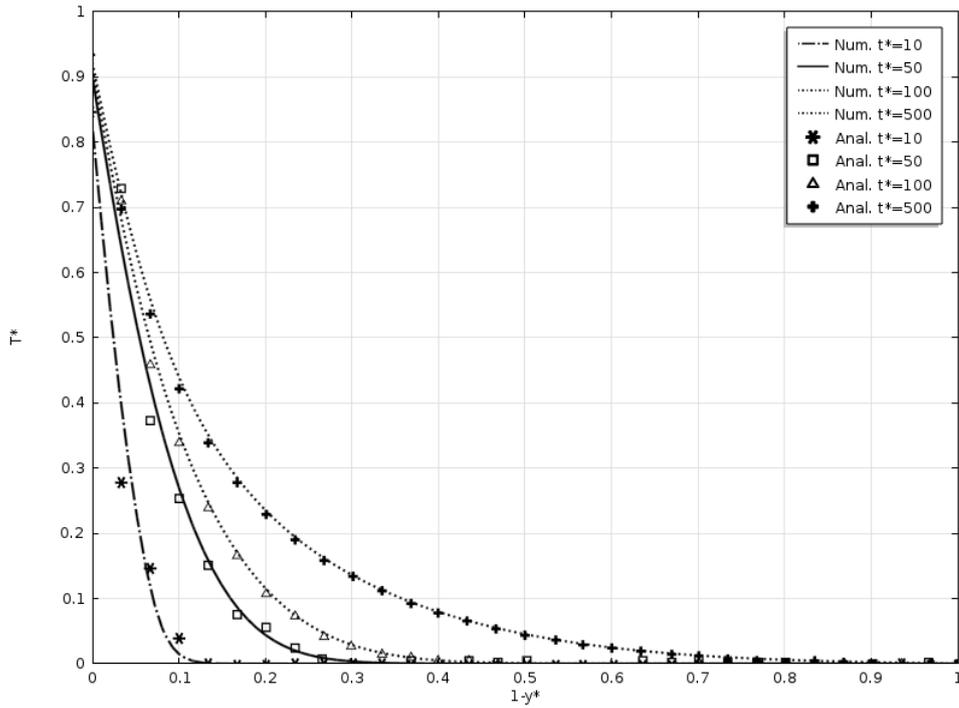


Figura 6.5: Comparação da solução de distribuição de temperatura adimensional ao longo da linha central via elementos finitos com a solução analítica de Ghazanfarian e Abbassi, 2012, para $Kn=0.1$

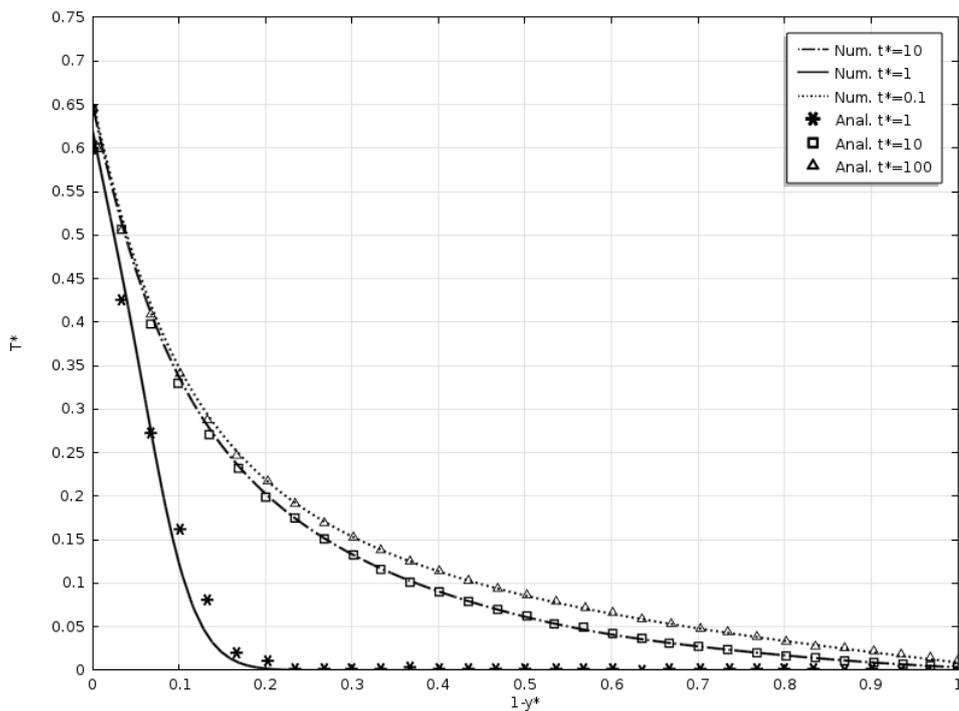


Figura 6.6: Comparação da solução de distribuição de temperatura adimensional ao longo da linha central via elementos finitos com a solução analítica de Ghazanfarian e Abbassi, 2012, para $Kn=1$

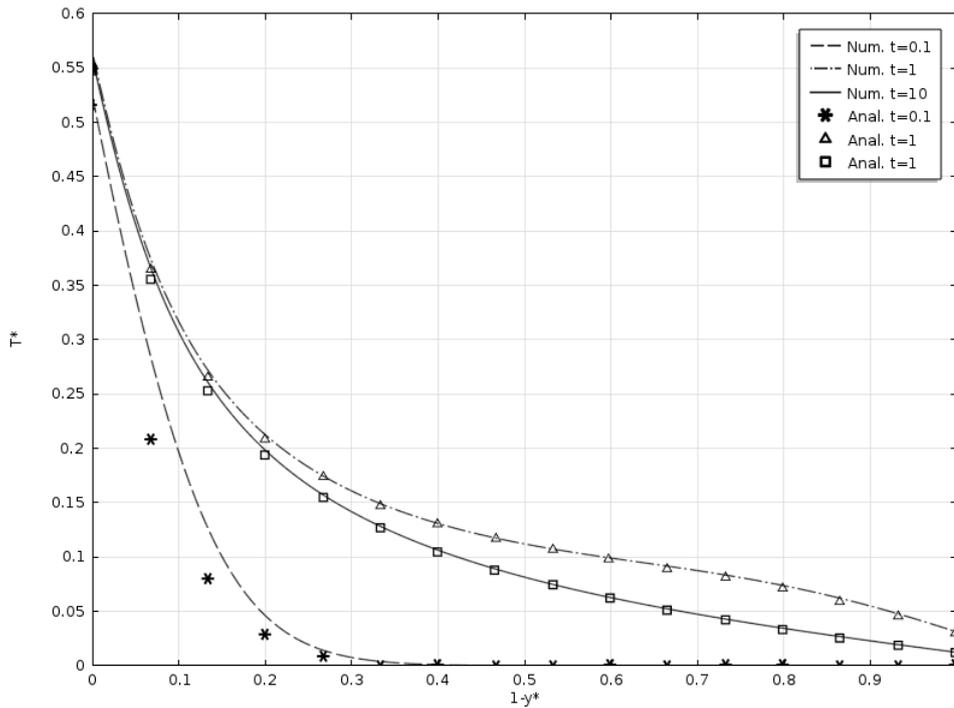


Figura 6.7: Comparação da solução de distribuição de temperatura adimensional ao longo da linha central via elementos finitos com a solução analítica de Ghazanfarian e Abbassi, 2012, para $Kn=10$

As Figuras 6.8 e 6.9 mostram as linhas isotermas de temperatura adimensional no interior do dispositivo para o tempo $t^* = 1$ para o MCDR e para o modelo de Fourier.

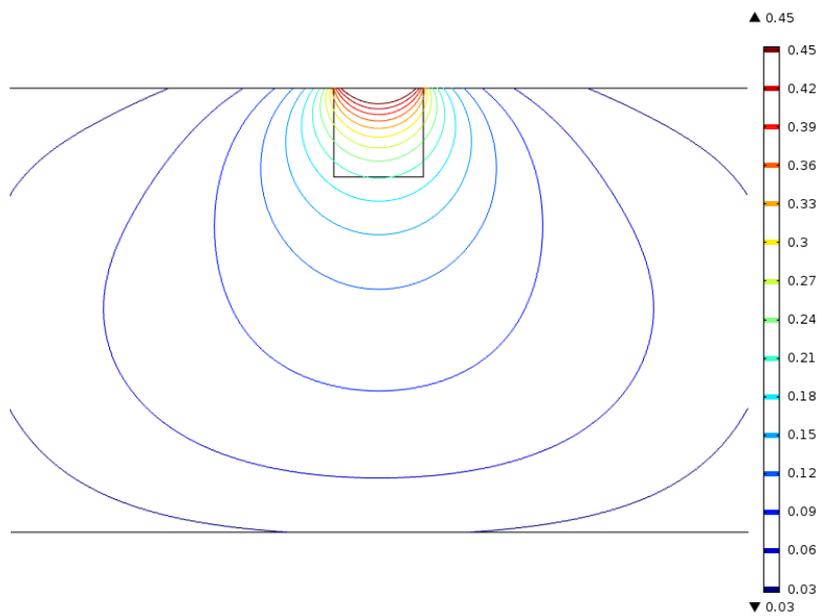


Figura 6.8: Linhas isotermas de temperatura adimensional para $Kn=10$ em $t^*=1$ para o modelo de duplo retardo

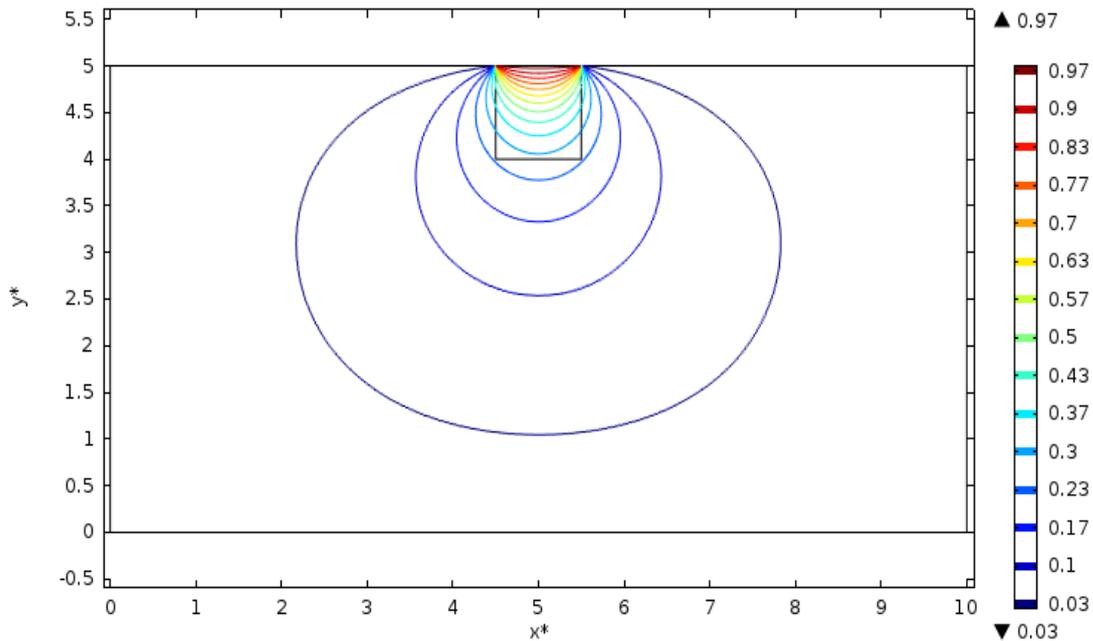


Figura 6.9: Linhas isotermas de temperatura adimensional para $Kn=10$ em $t^*=1$ para o modelo clássico de difusão

O MCDR mostra uma distribuição de temperatura bem diferente do que aquela apresentada pelo modelo de Fourier, onde para este último não se utilizou a condição de salto de temperatura proposta por Ghazanfarian e Abbassi (2012) e sim condições de contorno de temperatura prescrita. Verifica-se a partir da comparação das Figuras 6.8 e 6.9 que para o mesmo instante adimensional o modelo de Fourier prevê uma temperatura máxima de até 2.15 vezes maior do que aquela apresentada no do MCDR como pode ser observado na escala de temperaturas destas figuras.

CAPÍTULO VII

7. RESULTADOS

Neste Capítulo são apresentados os resultados das estimativas dos parâmetros do modelo de duplo retardo através da abordagem Bayesiana, para o Problema 2 apresentado no Capítulo V.

A solução do problema inverso foi realizada com as plataformas do COMSOL e Matlab trabalhando em conjunto. Ao instalar o COMSOL, existe uma opção para o usuário de instalar o *Comsol with Matlab*. Sendo assim, algoritmo do Metropolis-Hastings foi escrito no Matlab, que por sua vez faz o requerimento ao Comsol da solução do problema direto. Existem uma série de comandos, que podem ser encontrados no tutorial do Comsol, que devem ser escritos dentro do programa do Matlab para que haja esta comunicação entre as duas plataformas. Com estes comandos, o usuário é capaz de modificar parâmetros para a solução do problema direto, também como importar sua solução seja em um ponto específico ou em uma superfície, como também mudar a malha espacial, dentre outras funções.

Antes de serem apresentadas as estimativas do problema inverso, são apresentadas as soluções do problema direto para o ponto onde está localizado o sensor (ponto $P_4(5,5)$). Também são apresentados os coeficientes de sensibilidade, bem como o resultado referente à matriz de informação de Fisher.

Por fim, são apresentados os resultados da estimativa dos parâmetros de interesse através dos problemas inversos, utilizando técnicas Bayesianas. Para tanto, fez-se uso do Método de Monte Carlo Cadeia de Markov (MCMC), implementado através algoritmo de Metropolis-Hastings, conforme descrito no Capítulo IV.

Foram realizados dez casos para as estimativas, onde para os oito primeiros utiliza-se o problema com a fonte do tipo 1 e para os dois últimos casos o problema com a fonte do tipo 2, descritos no Capítulo V. Do primeiro ao sexto caso e do nono ao décimo caso, tomam-se distribuições *a priori* uniformes para os tempos de relaxação e distribuições *a priori* Gaussianas para a difusividade térmica e o número de Knudsen. No sétimo e oitavo caso tomam-se distribuições *a priori* uniformes para os tempos de relaxação e para o número de Knudsen e distribuições *a priori* Gaussianas para a difusividade térmica. As estimativas

foram realizadas com diferentes pontos de partida da Cadeia de Markov e diferentes desvios das medidas simuladas. Nos casos 1 ao 6 foi utilizado um computador CPU Intel Core I7-2600, com sistema operacional de 64 Bits, com frequência de processamento de 3.40GHz e 8GB de memória RAM instalada, enquanto que nos casos 7 a 10 foi utilizado um computador CPU Intel Core I7 – 6700, com sistema operacional de 64 Bits, com frequência de processamento de 3.40GHz e 32GB de memória RAM instalada (Corsair Vengeance), o que reflete no custo computacional da solução (ver Tabelas 7.2 e 7.6).

Ao final deste capítulo são apresentadas as estimativas indiretas dos tempos de relaxação do modelo de espalhamento de fônons uma vez que este se relacionam com os tempos de relaxação do modelo de duplo retardo como pode ser observado na Tabela 2.1.

7.1. Solução do problema direto no ponto do sensor

A Figura 7.1 apresenta a solução do problema direto no ponto onde o sensor está localizado, como mostrado na Figura 5.4, para o caso onde a fonte do tipo 1 foi utilizada. A escolha do posicionamento do sensor deve-se ao fato de que é onde ocorre o pico de temperatura deste problema, sendo, portanto, um ponto crítico no funcionamento do transistor já que afeta a sua eficiência e conseqüentemente o seu tempo de vida útil. A Figura 7.1 apresenta a temperatura dimensional deste ponto em relação ao tempo, que atinge um máximo de 313K no tempo $t=12ps$, enquanto a Figura 7.2 apresenta o mapa de temperatura adimensional na superfície do transistor no tempo $t^*=12$. A Figura 7.3 apresenta solução do problema direto no ponto onde o sensor está localizado, como mostrado na Figura 5.4, para o caso onde a fonte do tipo 2 foi utilizada, que atinge um máximo de 307K no tempo $t=7ps$.

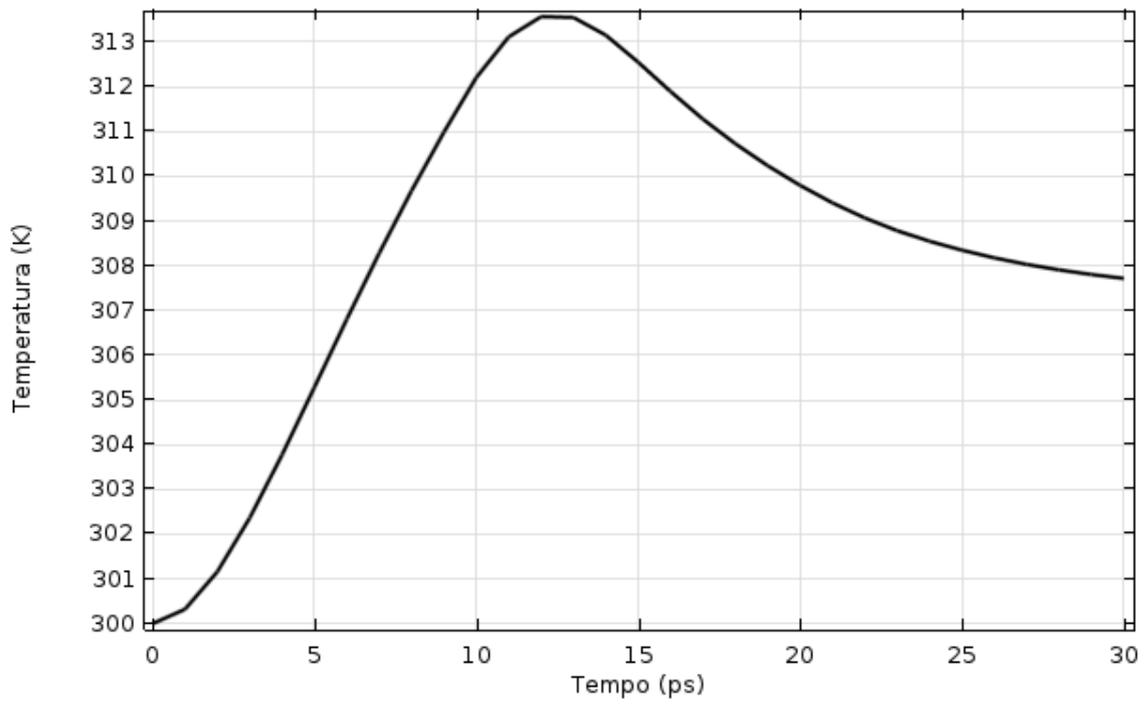


Figura 7.1: Solução do problema direto no ponto $P_4(5,5)$ com a fonte do tipo 1

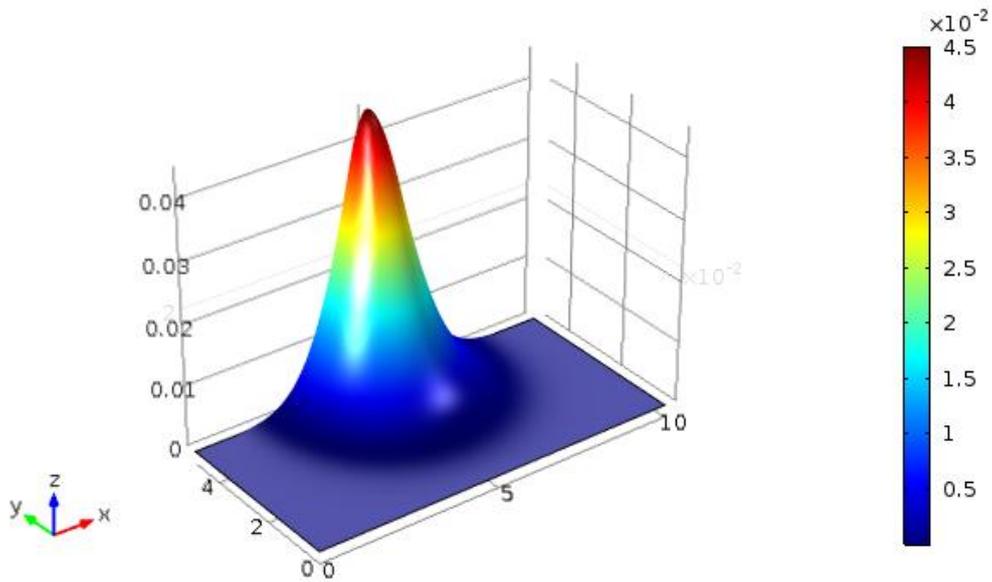


Figura 7.2: Mapa de Temperatura Adimensional na superfície do transistor no tempo $t^*=12$

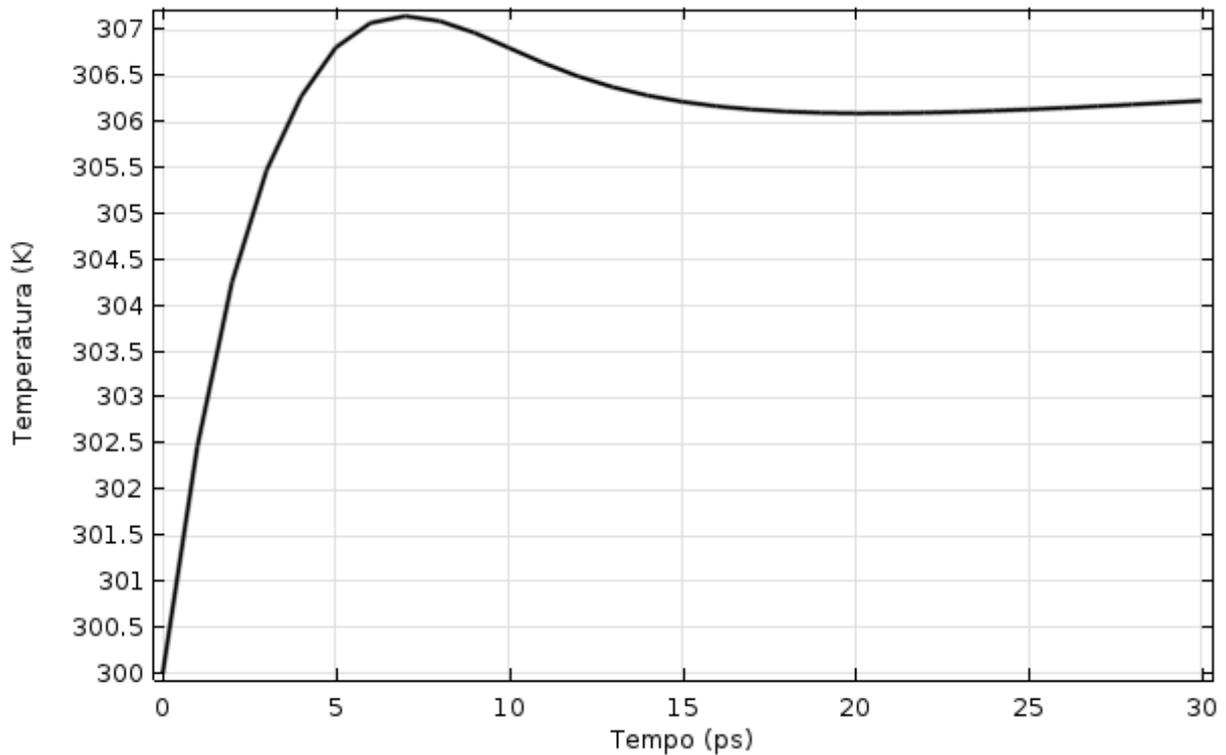


Figura 7.3: Solução do problema direto no ponto $P_4(5,5)$ com a fonte do tipo 2

7.2. Coeficientes de Sensibilidade

Nesta seção a análise dos coeficientes de sensibilidade dos parâmetros é apresentada a fim de se verificar quais parâmetros podem ser estimados e quais deles podem ser estimados simultaneamente. Para tanto, utilizou-se os coeficientes reduzidos, definidos anteriormente pela Eq. (3.12), calculados através do método das diferenças centradas (Eq. (3.11)). Os coeficientes de sensibilidade foram calculados com a temperatura adimensional dada por:

$$T^* = \frac{T - T_0}{T_0} \quad (7.1)$$

Neste modelo consideramos \mathbf{P} o vetor com 4 parâmetros, $\mathbf{P} = [\tau_q^*, \tau_T^*, \alpha^*, Kn]$ citados no Capítulo V. O problema inverso é focado na estimativa dos tempos de relaxação do vetor fluxo de calor e do gradiente de temperatura, que são parâmetros inerentes ao MCDR. A difusividade térmica e o número e Knudsen foram incluídos nas estimativas como

forma de agregar mais incerteza ao modelo. Nesta análise foi utilizado um tempo final de experimento de 30 ps .

Como parte da análise, variou-se a constante ε que é o incremento da Eq. (3.11), com finalidade de obter o valor mais adequado para o cálculo da derivada. Ambos os métodos de aproximação por diferenças centradas e avançadas tornam-se mais precisos quando ε é reduzido. Neste trabalho utilizou-se o método de aproximação por diferenças centradas. Contudo, à medida que ε se torna muito pequeno os erros numéricos se amplificam devido à precisão numérica computacional da diferença entre números muito próximos. Foi realizada uma análise em relação ao incremento ε desde 10^{-8} até 10^{-3} e verificou-se que o uso do incremento $\varepsilon = 10^{-6}$ reproduz resultados satisfatórios e sem erros numéricos. A Figura 7.4 e 7.5 apresentam os coeficientes de sensibilidade em relação ao tempo para o conjunto dos parâmetros do vetor \mathbf{P} juntamente com a curva do aumento da temperatura no ponto $P_4(5,5)$ onde está localizado o sensor para os casos com a fonte do tipo 1 e 2 respectivamente.

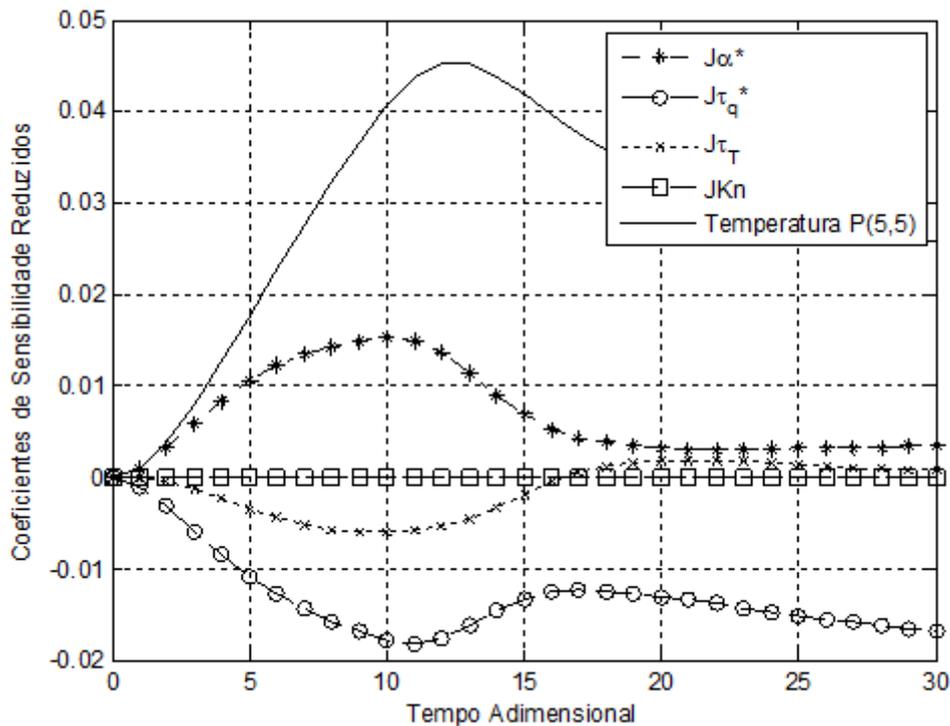


Figura 7.4: Coeficientes de sensibilidade reduzidos e temperatura no ponto $P_4(5,5)$ utilizando a fonte do tipo 1

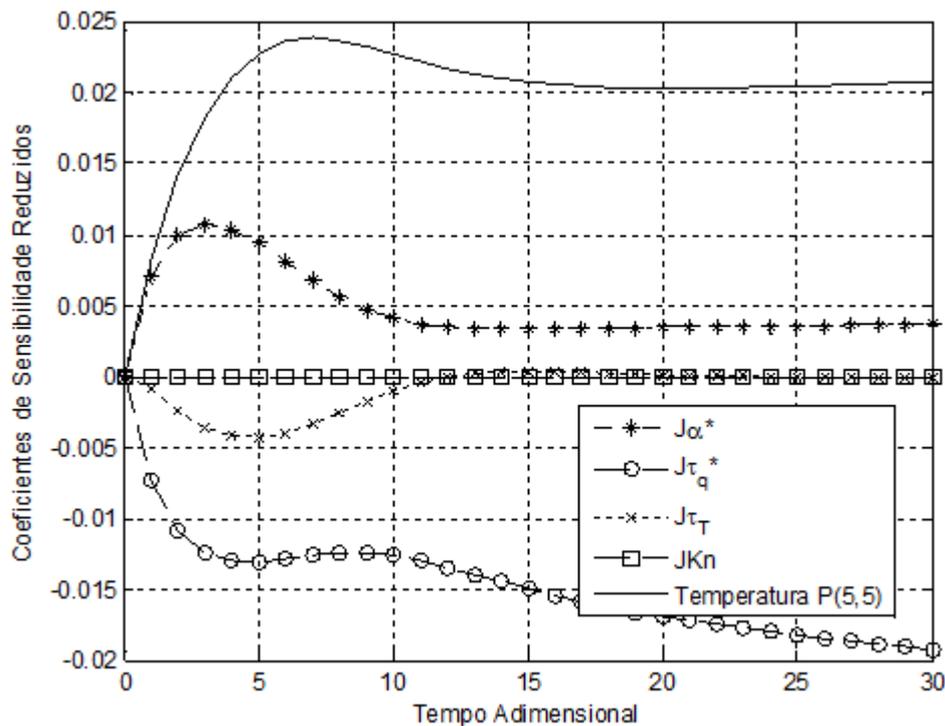


Figura 7.5: Coeficientes de sensibilidade reduzidos e temperatura no ponto $P_4(5,5)$ utilizando a fonte do tipo 2

As Figuras 7.4 e 7.5 mostram que o coeficiente de sensibilidade com respeito a difusividade térmica e aos tempos de relaxação são da mesma ordem de magnitude da variação de temperatura. Por outro lado, a magnitude do coeficiente de sensibilidade com respeito ao número de Knudsen é praticamente nulo. Neste caso o número de Knudsen aparece no salto de temperatura da condição de contorno inferior, não afeta significativamente a medição de temperatura na posição do sensor durante o período analisado. As Figuras 7.4 e 7.5 também mostram que os coeficientes com respeito a difusividade térmica e o tempo de relaxação do gradiente de temperatura tendem a se tornarem linearmente dependentes. Por outro lado os coeficientes de sensibilidade com respeito aos tempos de relaxação não são linearmente dependentes e podem ser estimados simultaneamente utilizando as medidas de temperatura tomadas na superfície superior do transistor. As divisões entre os coeficientes de sensibilidade da difusividade térmica, do tempo de relaxação devido ao fluxo de calor e do tempo de relaxação devido ao gradiente de temperatura, apresentados na Figura 7.4 podem ser encontrados no Apêndice IV para exemplificar o comportamento da dependência linear entre os mesmos como explicado neste parágrafo para ambos os casos.

7.3. Otimização do Experimento

Como visto no Capítulo IV, a otimização do experimento pode ser dada através da minimização da região de confiança das estimativas. Sendo assim, para minimizar o hiper-volume da região de confiança, deve-se maximizar o determinante da matriz $\mathbf{J}^T\mathbf{J}$, chamada matriz de informação de Fisher (Orlande, 2000). Portanto, antes de se iniciar o procedimento de solução do problema inverso, analisou-se o determinante da matriz de informação de Fisher mudando o conjunto de parâmetros envolvidos na estimativa, como pode ser observado nas Figuras 7.7 e 7.8 para os casos com as fontes do tipo 1 e 2, respectivamente. Claramente, o caso onde há a estimativa de todos os 3 parâmetros, exceto o número de Knudsen, é o caso mais difícil de estimação dentre os casos apresentados, já que possui menor ordem de grandeza no determinante da matriz de informação de Fisher. Os casos que apresentam maior facilidade de estimação é a estimação simultânea entre τ_q e α , seguido dos parâmetros τ_q e τ_T , depois α e τ_T e por fim α, τ_q e τ_T . Neste trabalho, irá tentar-se estimar simultaneamente os parâmetros τ_q e τ_T , que são nossos parâmetros de interesse. Observa-se também nas Figuras 7.6 e 7.7 a baixa magnitude que estas curvas atingem o que se traduz em um alto grau de dificuldade no processo de estimativa. O tempo utilizado para a estimativa dos parâmetros será $0 \text{ ps} < t < 30 \text{ ps}$, visto que após o tempo até mesmo em 30ps as curvas dos determinantes da matriz de informação de Fisher parecem agregar informações para estas estimações.

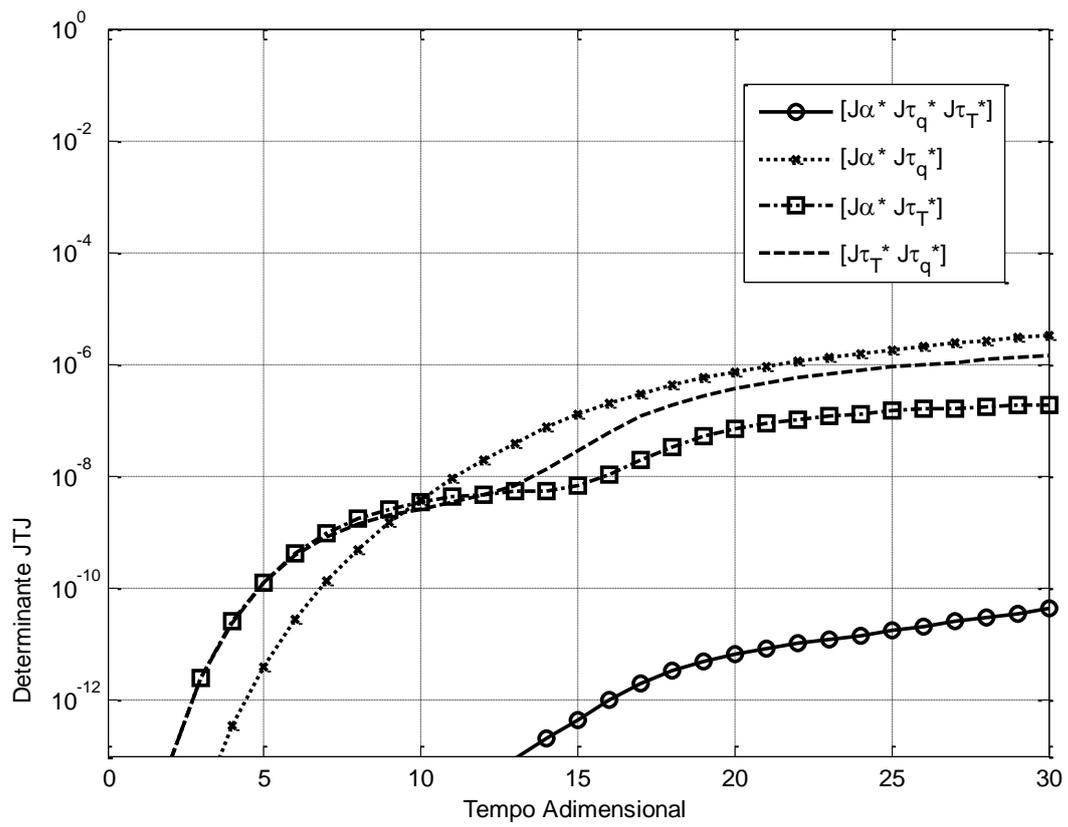


Figura 7.6: Evolução do Determinante da Matriz de Informação de Fisher para a fonte do tipo 1

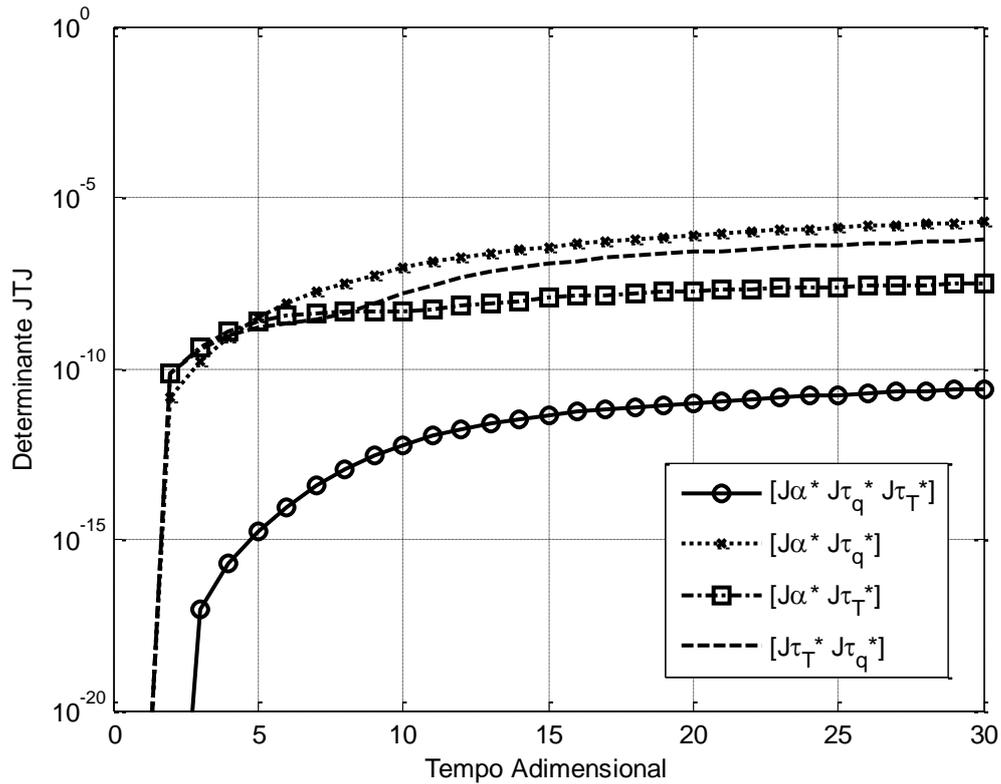


Figura 7.7: Evolução do Determinante da Matriz de Informação de Fisher para fonte do tipo 2

A localização do sensor sendo na superfície do transistor, no ponto $P_4(5,5)$ em coordenadas adimensionais, deve-se ao fato de ser a região onde os picos de temperatura ocorrem em um transistor (Yang *et al.* 2005; Ghazanfarian e Shommali, 2012; Nasri, 2015) como também somente ser possível tomar uma medida não intrusiva para a medição da temperatura em um dispositivo nesta escala. As medições de temperatura nesta escala podem ser feitas através da técnica, inventada originalmente em 1986 por Williams e Wickramasinghe, de Microscopia Térmica de Varredura (em inglês *Scanning Thermal Microscopy*), que utiliza um microscópio de força atômica e um sensor para medição de temperatura na ponta de prova do microscópico. Esta técnica permite também mapear a topografia da superfície e medir a condutividade térmica e a difusividade térmica. Uma revisão desta técnica com resolução nanométrica pode ser encontradas em Gomès *et al.* 2015 e Kim *et al.*,2012.

7.4. Estimativas obtidas através do Problema Inverso

Realizadas as análises dos coeficientes de sensibilidade e do projeto de experimento ótimo, essenciais para a identificação de quais parâmetros de interesse podem ser estimados simultaneamente, fez-se uso do método MCMC através do algoritmo de Metropolis-Hastings descrito no Capítulo IV para a estimação dos mesmos. São realizadas estimativas realizando os problemas diretos tanto com a fonte do tipo 1 quanto a fonte do tipo 2.

Para as estimativas utilizando a fonte do tipo 1, foram atribuídas diferentes tipos de distribuições *a priori* para os parâmetros. Do primeiro ao sexto caso apresentado neste trabalho, para os parâmetros α e Kn tomou-se uma *priori* informativa, sendo estas, distribuições Gaussianas centradas em seu valor médio, com desvios padrões de 1% e 5% do seu valor médio respectivamente que satisfazem a restrição de positividade dos parâmetros.

As distribuições *a priori* para os parâmetros foram descritas considerando análise dos coeficientes de sensibilidade como também as informações disponíveis na literatura. As *prioris* não informativas dos tempos de relaxação do MCDR foram tomadas com base nos tempos de relaxação do MEF para semicondutores na faixa de 10^{-13} s a 10^{-10} s (Valdervez, 1994), devido à grande dificuldade de encontrar valores na literatura para os tempos de relaxação do MCDR. Fazendo a correspondência desta faixa para os tempos relaxação do MEF com os do MCDR através da relação presente na Tabela 2.1, temos as seguintes distribuições *a priori* uniformes: $1 \times 10^{-13} \text{ s} < \tau_q < 1 \times 10^{-10} \text{ s}$ e $1.8 \times 10^{-13} \text{ s} < \tau_T < 1.8 \times 10^{-10} \text{ s}$. Portanto, para os parâmetros τ_q^* e τ_T^* foram tomadas distribuições uniformes com base nos intervalos $0.1 < \tau_q^* < 100$ e $0.18 < \tau_T^* < 180$.

As medidas simuladas foram geradas da seguinte maneira:

$$Y_{\text{simuladas}} = Y_{\text{problema direto, exato}} + \sigma w \quad (7.2)$$

onde, $Y_{\text{problema direto, exato}}$ é obtida pela solução do problema direto com os parâmetros conhecidos, σ é o desvio padrão das medidas e w é uma variável aleatória com distribuição normal, média zero e desvio padrão unitário. O intervalo de credibilidade foi calculado a partir dos quantis de probabilidade a posteriori acumulativa.

Em todos os casos analisados foram tomadas 30 medidas igualmente espaçadas no intervalo de tempo de $0 \text{ ps} < t < 30 \text{ ps}$.

As propriedades do silício utilizadas neste trabalho para a geração das medidas simuladas estão presentes na Tabela 7.1 tendo os seus dados retirados de Ghazanfarian e Shomalli (2012) e Yang *et al* (2005) e seus valores adimensionais estão presentes na Tabela 7.1. Os valores exatos dos tempos de relaxação do MCDR presentes na Tabela 5.1 foram tomados a partir da consideração feita por Yang *et al.* (2005) tomando a velocidade de propagação dos fônons como constante com valor igual a 3000m/s (e a partir daí o valor de τ_q calculado através de: $\tau_q = \Lambda/v$), ignorando a diferença de propagação dos fônons dos ramos ópticos e acústicos. Portanto, a relação de dispersão dos fônons não é levada em conta que uma vez considerada pode levar à mudanças dos parâmetros como calor específico, velocidade dos fônons e livre caminho médio. Portanto, neste trabalho, os valores exatos dos tempos do MEF que têm uma relação com aqueles do MCDR não levam em conta informações espectrais sobre a dispersão dos fônons.

Tabela 7.1. Parâmetros Adimensionais utilizados neste trabalho (Yang *et al*, (2005), Ghazanfarian e Shomalli (2012))

τ_q^*	τ_T^*	k^*	C^*	α^*	Λ^*
33.33	1.66	1	1	1	10

A Tabela 7.2 resume os casos analisados para a estimativa simultânea dos tempos de relaxação do MCDR, descrevendo as *prioris* utilizadas para cada parâmetro, as estimativas iniciais o desvio padrão das medidas simuladas e o tempo computacional para cada caso. As estimativas iniciais dos tempos de relaxação foram tomadas em alguns casos como 50.5 que é o valor adimensional referente ao valor médio da distribuição uniforme do parâmetro τ_q . Foram utilizados 30 mil estados da cadeia de Markov nestas análises considerando um período de aquecimento de 5 mil estados.

Tabela 7.2. Casos analisados

Casos	Parâmetros	<i>Prioris</i>	Estimativa Inicial	Desvio Padrão das Medidas Simuladas	Tempo Computacional (h)
1	τ_q^* e τ_T^*	Uniforme	10 e 10	$0.01T_{\max}^*$	13,07
	α^* e Kn	Gaussiana	1 e 10		
2	τ_q^* e τ_T^*	Uniforme	50.5 e 50.5	$0.01T_{\max}^*$	13,23
	α^* e Kn	Gaussiana	1 e 10		
3	τ_q^* e τ_T^*	Uniforme	10 e 10	$0.05T_{\max}^*$	13,54
	α^* e Kn	Gaussiana	1 e 10		
4	τ_q^* e τ_T^*	Uniforme	10 e 10	$0.1T_{\max}^*$	14,14
	α^* e Kn	Gaussiana	1 e 10		
5	τ_q^* e τ_T^*	Uniforme	50.5 e 50.5	$0.05T_{\max}^*$	13,45
	α^* e Kn	Gaussiana	1 e 10		
6	τ_q^* e τ_T^*	Uniforme	50.5 e 50.5	$0.1T_{\max}^*$	13,59
	α^* e Kn	Gaussiana	1 e 10		

A Tabela 7.3 apresenta os resultados das estimativas para os seis casos da Tabela 7.2, onde a média estimada é a média da cadeia de Markov sem os estados de aquecimento. Os parâmetros foram estimados com um intervalo com um nível de 99% de credibilidade (0,5%

e 99,5% quantis) da distribuição marginal posteriori obtidas através das amostras simuladas das cadeias de Markov. Em geral, as médias estimadas estão em excelente acordo com os valores exatos dos parâmetros apesar dos grandes desvios das medidas simuladas dos casos 3 a 6. Além disto, os intervalos de credibilidade não foram afetados significativamente pelo ponto de partida das cadeias ou pelo desvio padrão das medidas simuladas. Observa-se na Tabela 7.3 que parâmetro do tempo de relaxação devido ao gradiente de temperatura apresenta as maiores variâncias, isto devido à sua *priori* uniforme e à baixa magnitude do seu coeficiente de sensibilidade.

Tabela 7.3. Resultados da estimação de parâmetros via Problemas inversos para os casos apresentados na Tabela 7.2

Casos	Parametro Adimensional	Valor Exato Adimensional	Passo de Procura	Média Estimada	Desvio Padrão das Cadeias	Intervalo de Credibilidade	
						LI	LS
1	τ_g^*	33,330	0,1000	34,0480	2,5554	28,5574	38,6043
	τ_t^*	1,660	0,1497	1,8606	0,5688	0,6400	2,8587
	α^*	1,000	0,1000	0,9966	0,0506	0,8535	1,0754
	Kn	10,000	0,0100	9,9979	0,0972	9,7520	10,1583
2	τ_g^*	33,330	0,0100	33,0488	0,4956	31,8317	33,8861
	τ_t^*	1,660	0,1497	1,6210	0,1032	1,3430	1,7955
	α^*	1,000	0,0100	0,9966	0,0374	0,9085	1,0610
	Kn	10,000	0,0010	10,0049	0,0998	9,7028	10,1531
3	τ_g^*	33,330	0,1000	32,9194	1,1921	31,0409	35,0031
	τ_t^*	1,660	0,1497	1,7067	0,2842	1,2439	2,1717
	α^*	1,000	0,1000	0,9951	0,0497	0,9114	1,0758
	Kn	10,000	0,0100	9,9991	0,0940	9,8455	10,1515
4	τ_g^*	33,330	0,1000	33,1342	2,2331	29,6038	37,0019
	τ_t^*	1,660	0,1497	1,3567	0,4664	0,6233	2,1580
	α^*	1,000	0,1000	0,9918	0,0506	0,9083	1,0742
	Kn	10,000	0,0100	10,0020	0,1011	9,8333	10,1651
5	τ_g^*	33,330	0,0400	34,9433	1,3595	32,7575	37,2201
	τ_t^*	1,660	0,1498	1,6856	0,2932	1,2141	2,1797
	α^*	1,000	0,1000	0,9916	0,0512	0,9104	1,0739
	Kn	10,000	0,0100	10,0025	0,0994	9,8407	10,1646
6	τ_g^*	33,330	0,1000	34,8065	2,5353	30,8059	39,1948
	τ_t^*	1,660	0,1497	1,8888	0,5416	1,0582	2,8436
	α^*	1,000	0,1000	1,0014	0,0494	0,9177	1,0807
	Kn	10,000	0,0100	9,9969	0,0999	9,8306	10,1588

As Figuras 7.8-7.11 mostram as cadeias de Markov para os quatro parâmetros e seus respectivos valores exatos (representados por uma linha branca) para os casos 3- 6 respectivamente, que são aqueles com maior desvio padrão nas medidas simuladas. A rápida convergência das amostras geradas com o algoritmo Metropolis-Hastings podem ser observadas nestas figuras. Percebe-se que todas as cadeias tornam-se estacionárias em torno de seus valores exatos, não importando o quão longe tenha sido sua estimativa inicial (no caso dos parâmetros τ_q^* e τ_T^*).

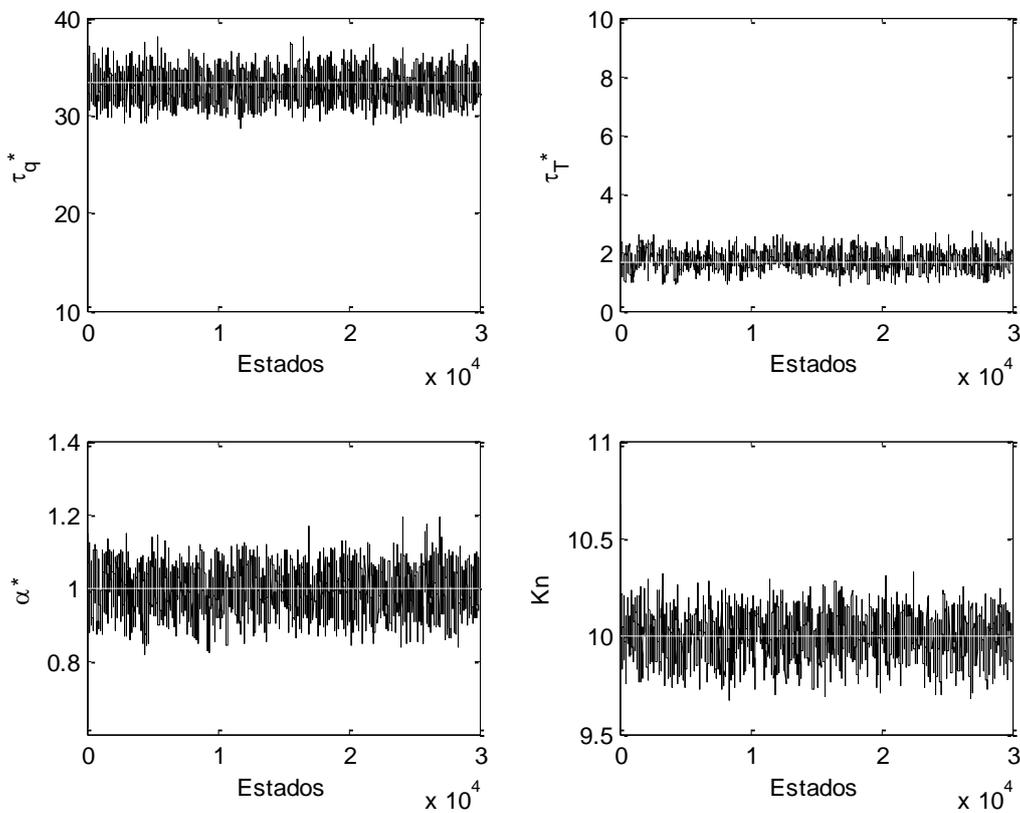


Figura 7.8: Cadeias de Markov para o Caso 3

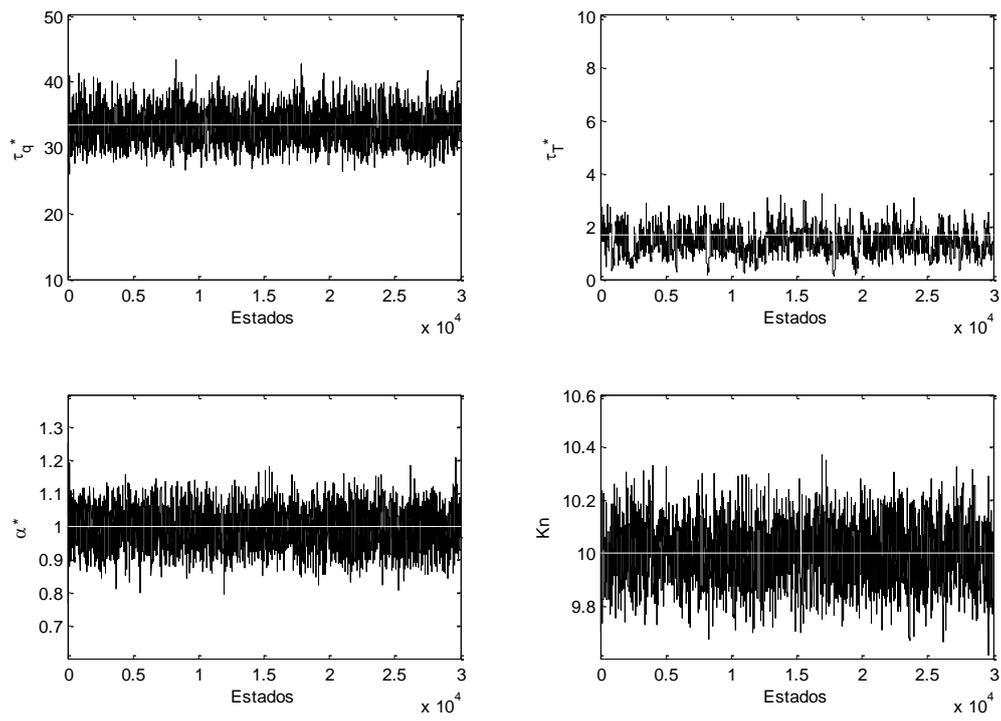


Figura 7.9: Cadeias de Markov para o Caso 4

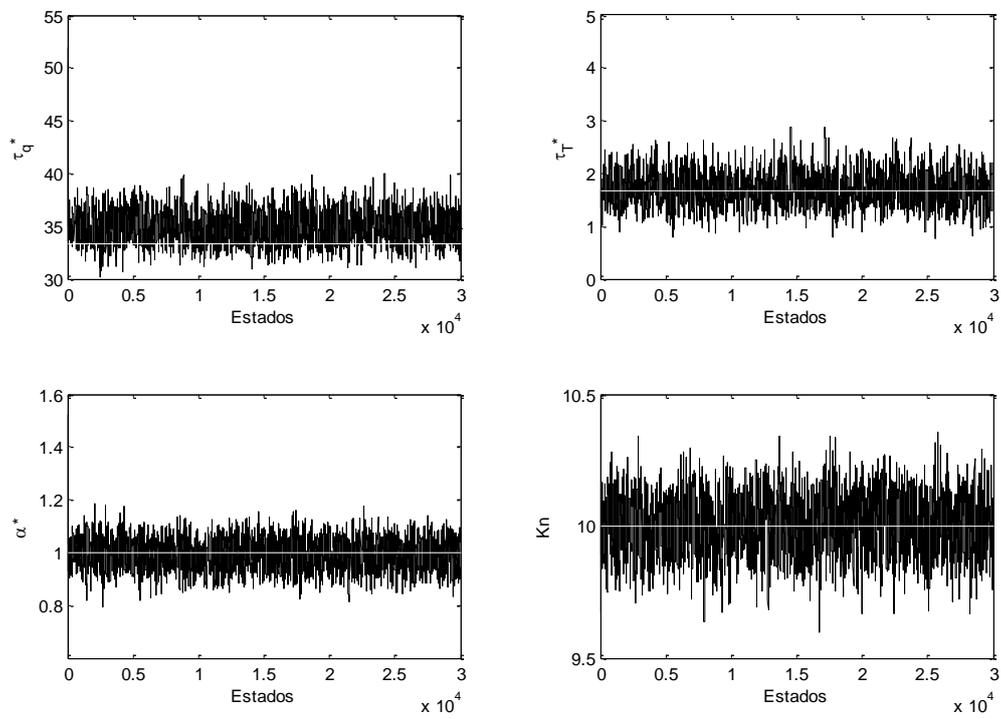


Figura 7.10: Cadeias de Markov para o Caso 5

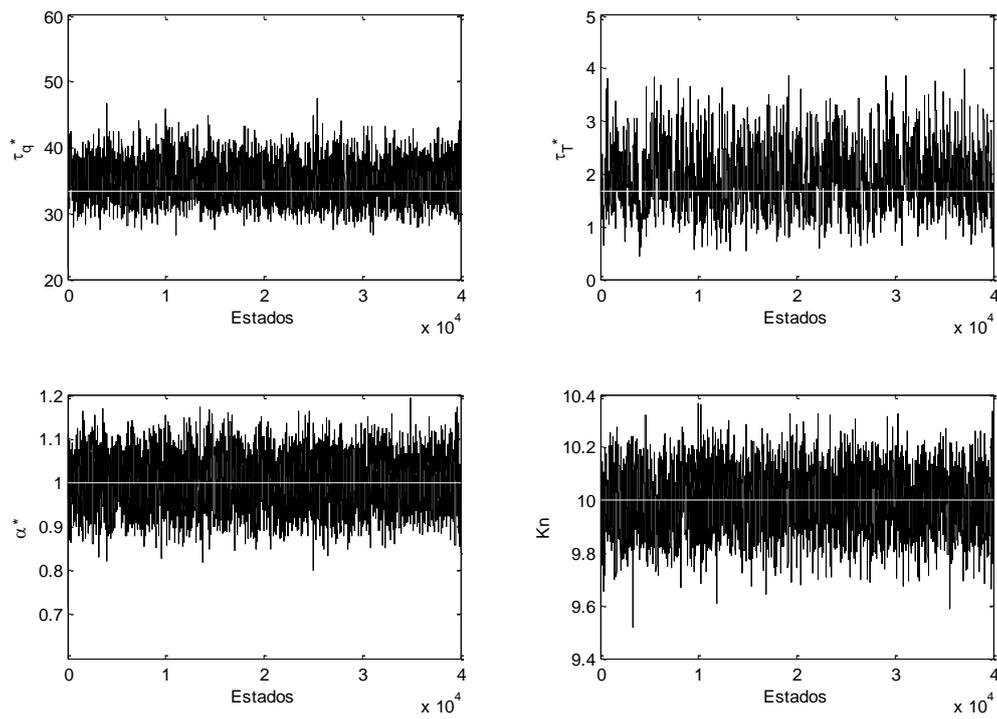


Figura 7.11: Cadeias de Markov para o Caso 6

As Figuras 7.12- 7.15 ilustram a distribuição marginal posteriori representada por histogramas para cada parâmetro dividido pelo seu valor exato, para os casos 3 a 6, respectivamente. Percebe-se que todos os histogramas aproximam-se de distribuições Gaussianas já que a verossimilhança é uma Gaussiana e as *prioris* são Gaussianas ou uniformes.

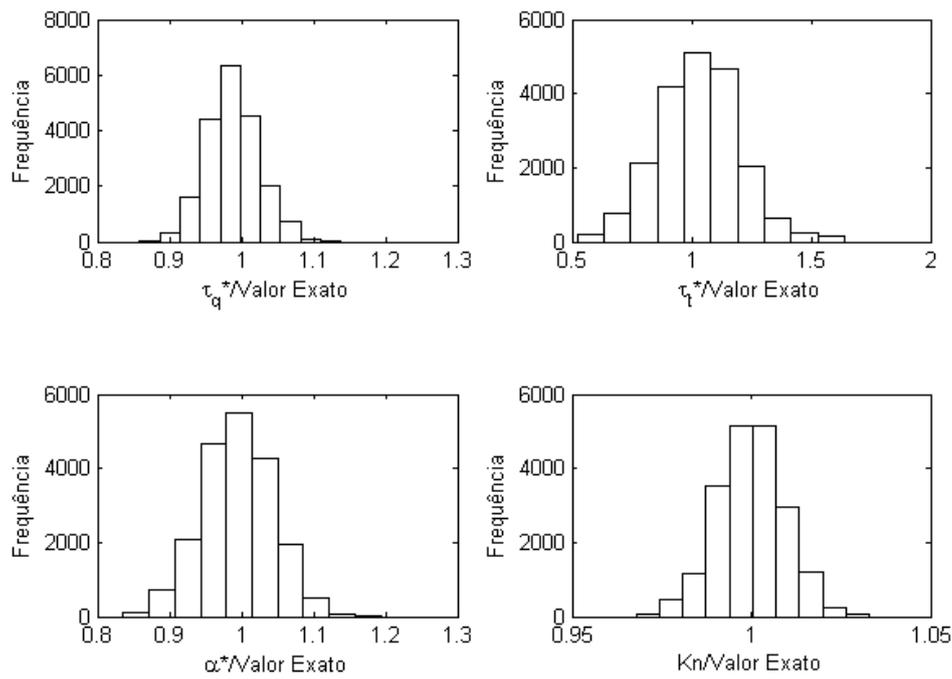


Figura 7.12: Histogramas do Caso 3

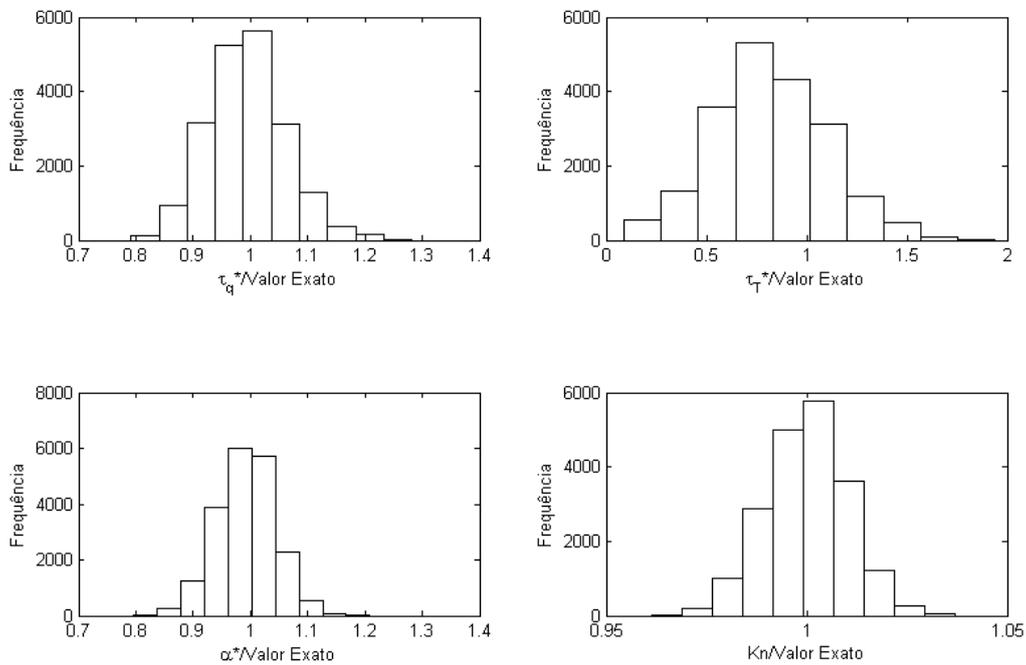


Figura 7.13: Histogramas do Caso 4

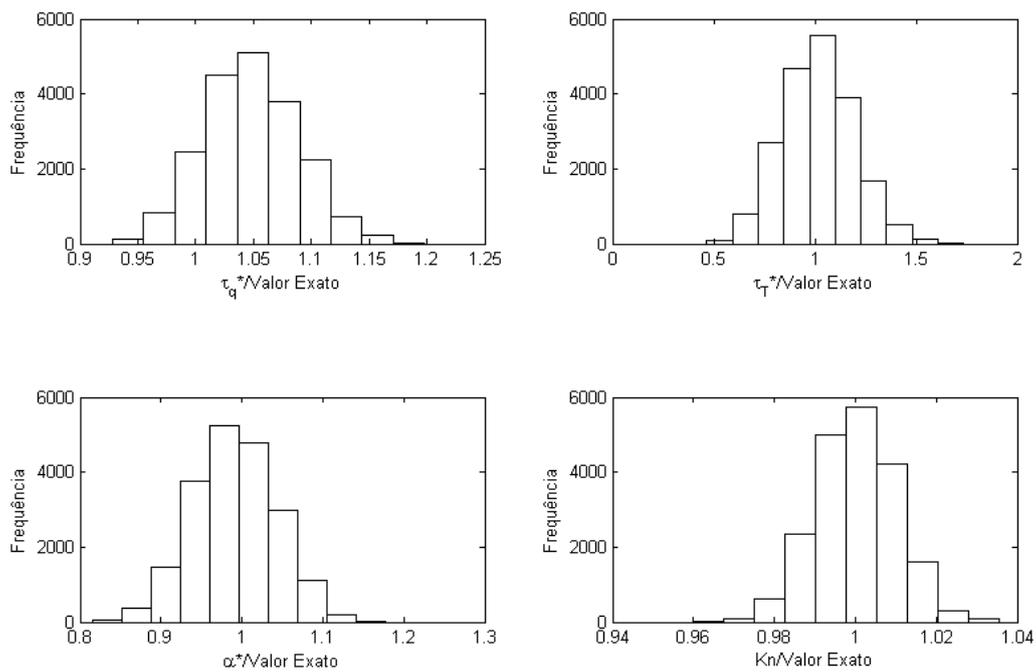


Figura 7.14.: Histogramas do Caso 5

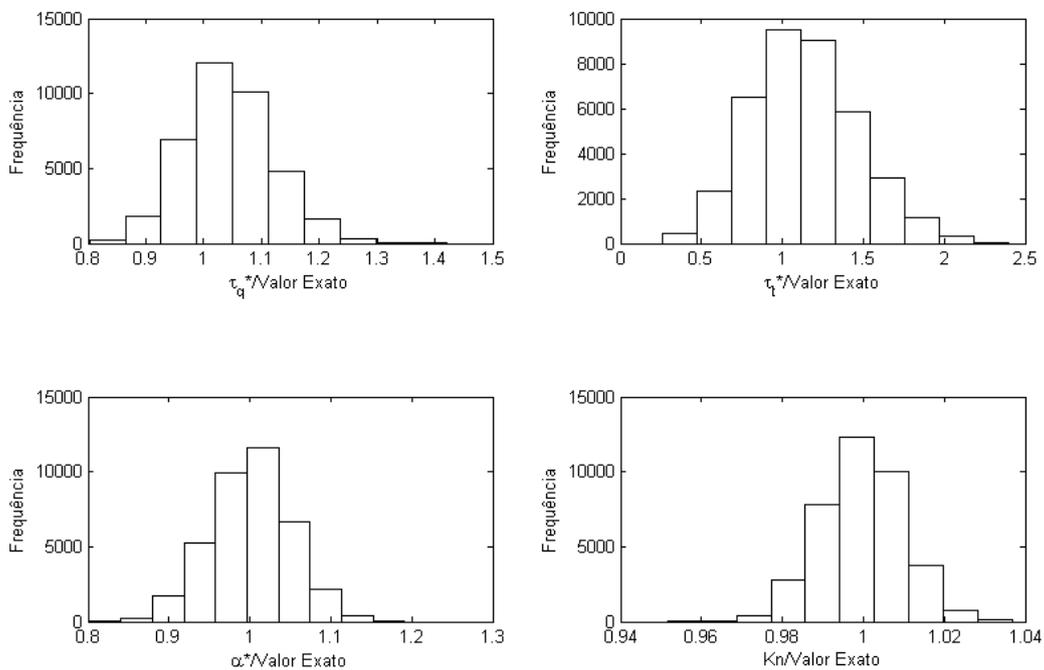


Figura 7.15: Histogramas do Caso 6

As Figuras 7.16-7.19 mostram a função de auto covariância normalizada para τ_q^* e τ_T^* e também a função cruzada normalizada de auto covariância entre os mesmos para os casos 3 a 6 respectivamente. Verifica-se através destes gráficos que as cadeias não são correlacionadas.

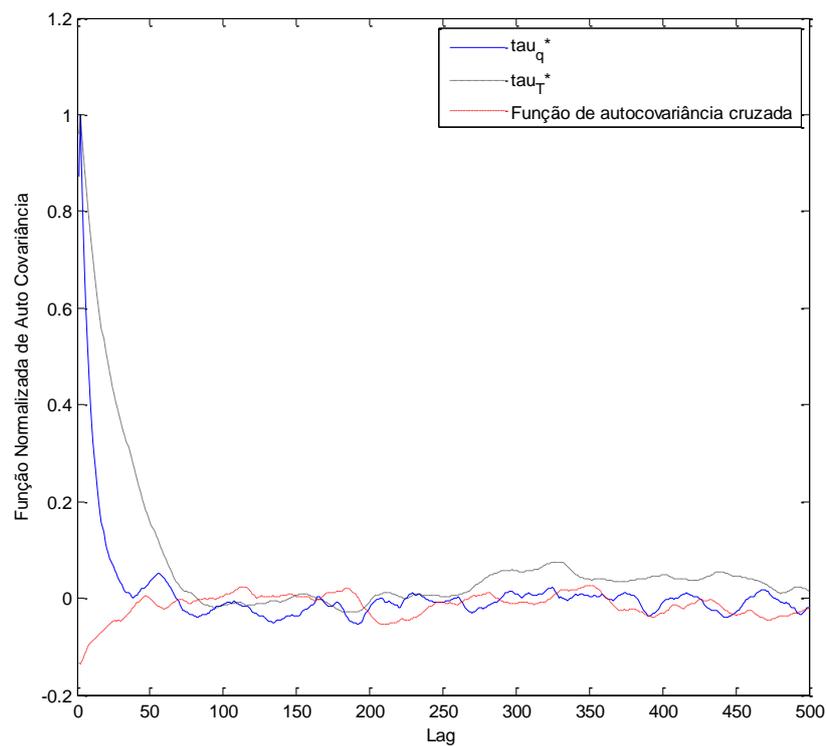


Figura 7.16: Função de Auto covariância – Caso 3

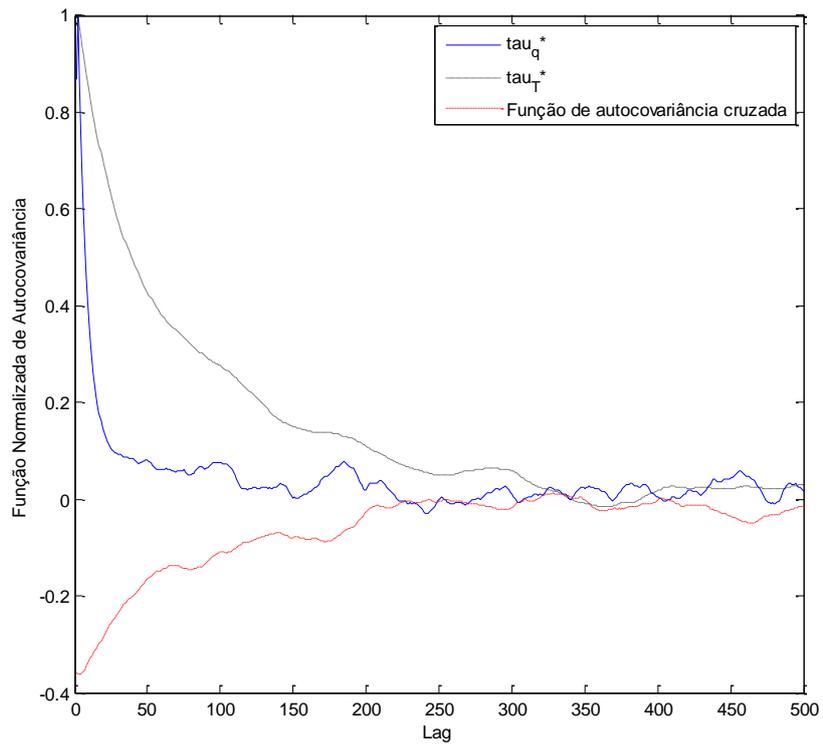


Figura 7.17: Função de Auto covariância – Caso 4

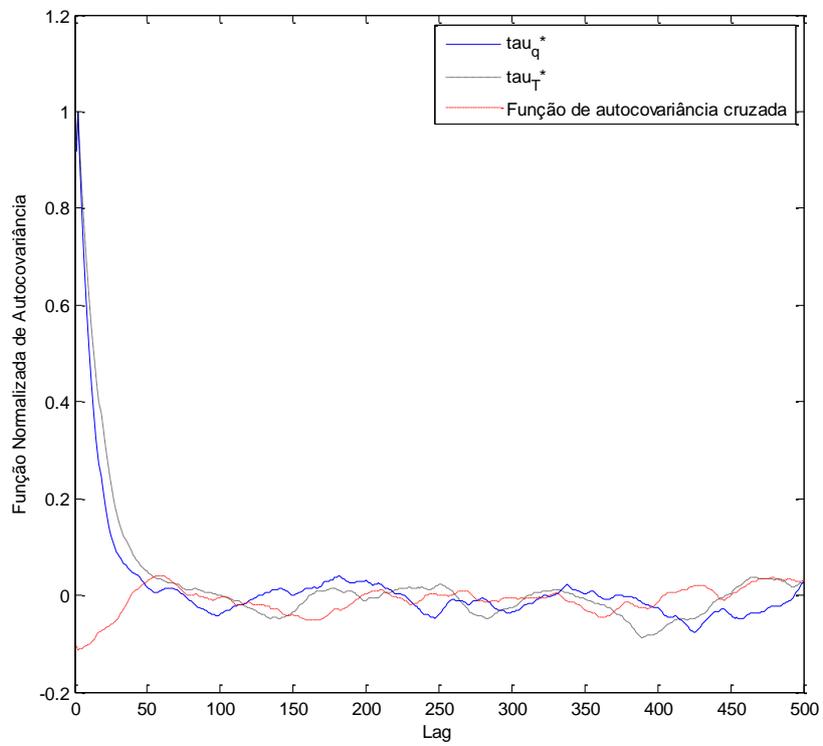


Figura 7.18 Função de Auto covariância – Caso 5

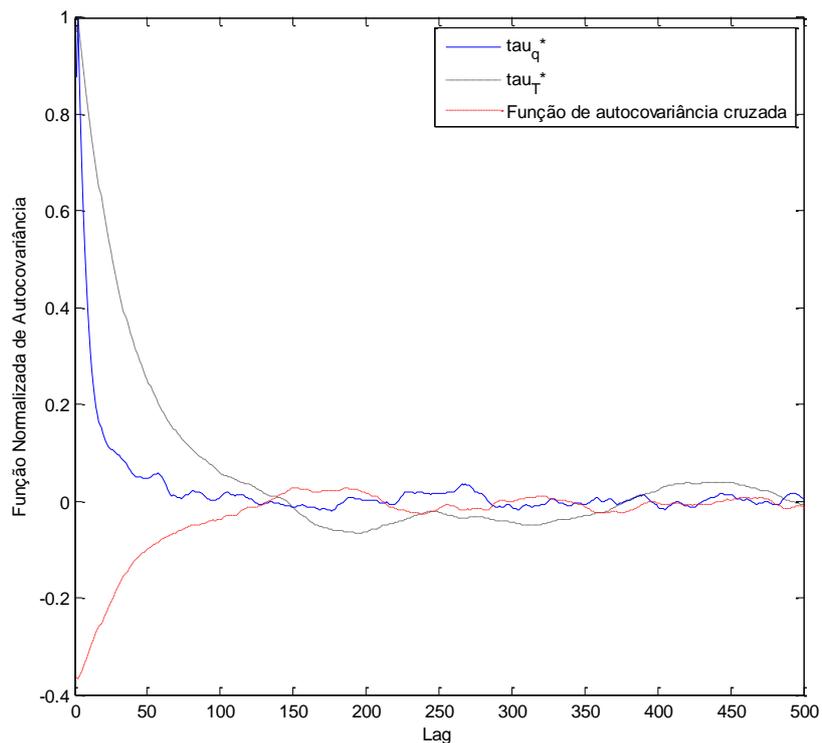


Figura 7.19: Função de Auto covariância – Caso 6

As Figuras 7.20 - 7.23 mostram os intervalos de credibilidade para as médias estimadas e seus valores exatos de acordo com os valores presentes na Tabela 7.3 para os casos 3 a 6 respectivamente. Como explicado no Capítulo IV, os intervalos de credibilidade foram calculados a partir dos quantis da amostra *a posteriori* por uma função no *Matlab*. Estas figuras indicam que para todos os casos os parâmetros estimados estão em concordância com seus respectivos valores exatos e que as incertezas das médias são pequenas. É importante notar que estes casos apresentados nas figuras, são casos que já possuem uma grande incerteza nas medidas (5% e 10% dos seus valores máximos) e que seus parâmetros foram estimados com sucesso.

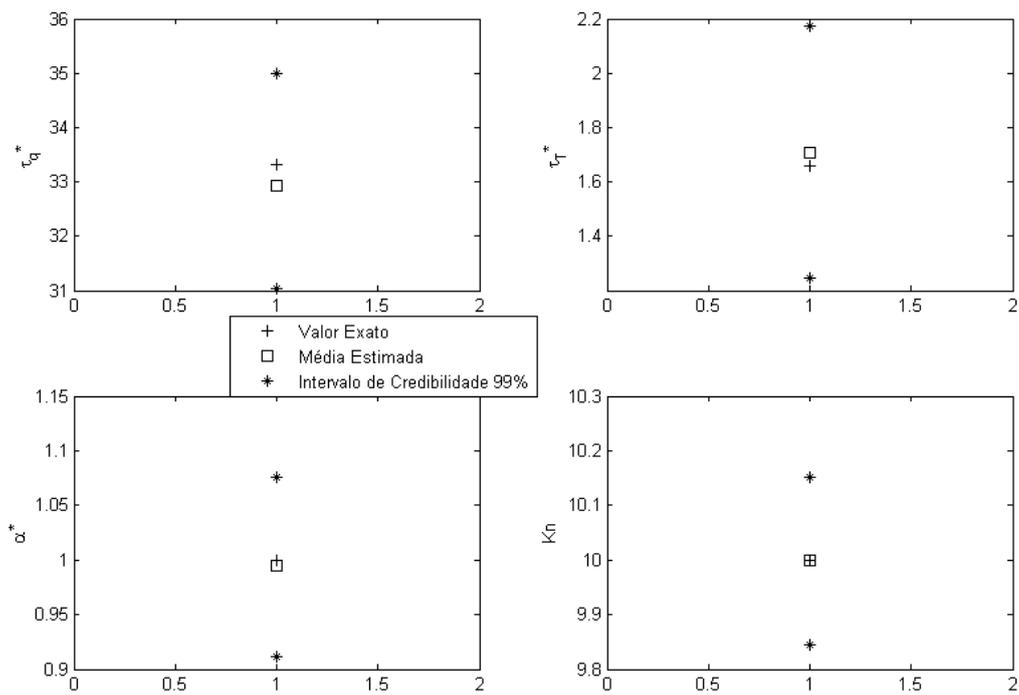


Figura 7.20: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 3

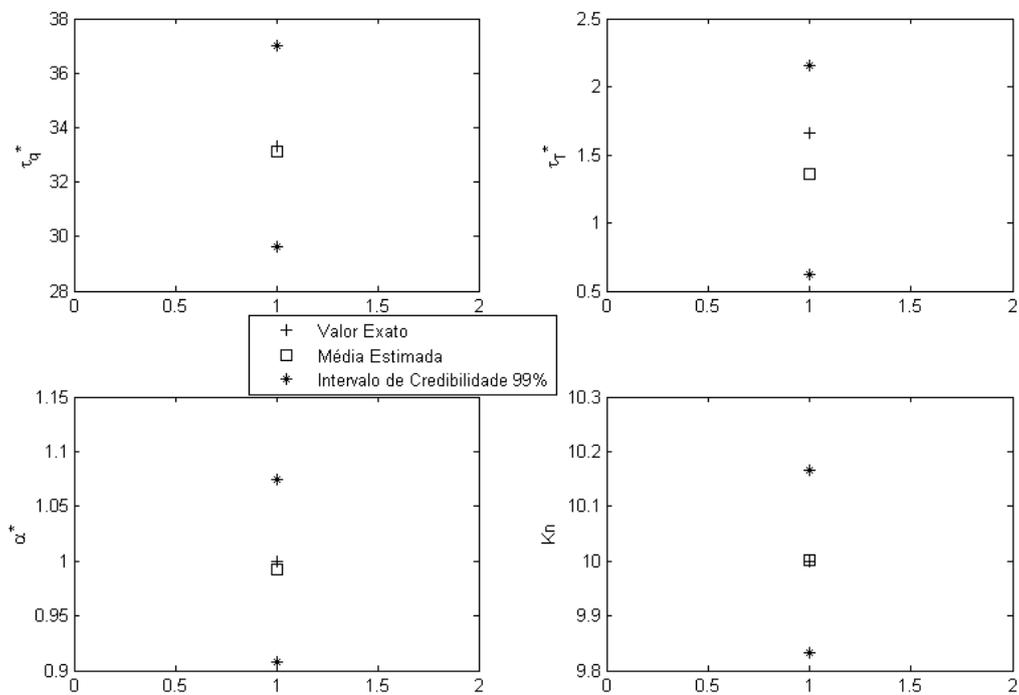


Figura 7.21: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 4

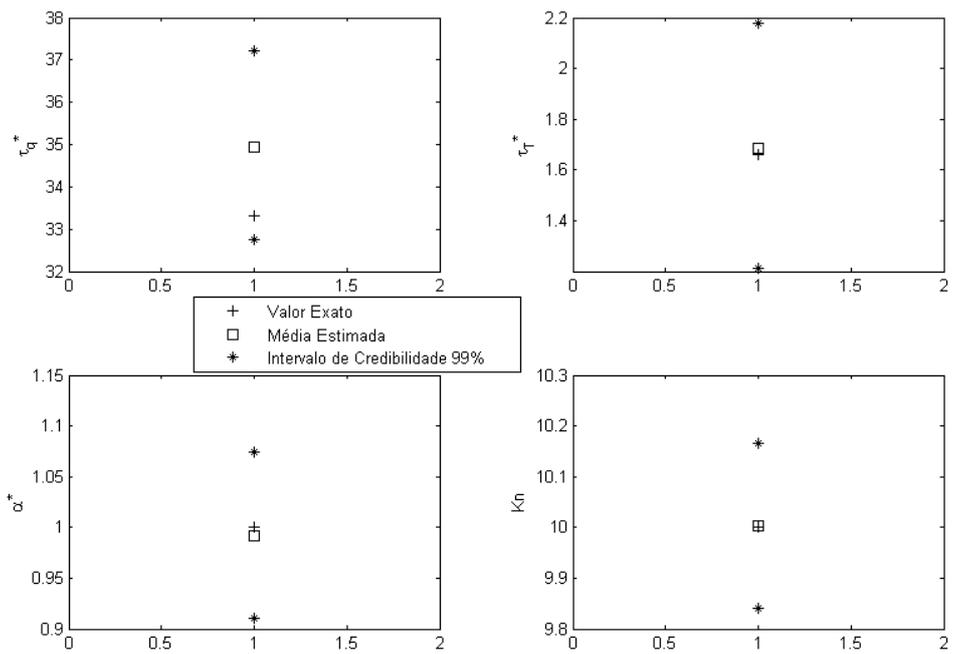


Figura 7.22 Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 5

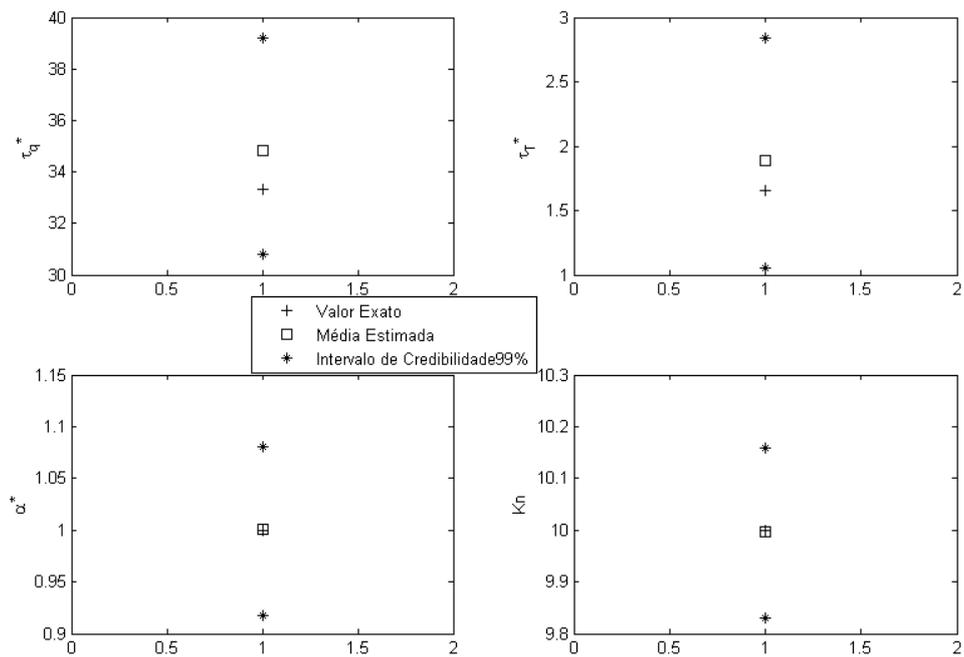


Figura 7.23: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 6

As Figuras 7.24 - 7.27 mostram os intervalos de confiança das médias das cadeias dos parâmetros para os casos 3 a 6 respectivamente. O intervalo de confiança foi obtido com base no desvio padrão da média, através do cálculo do tempo de auto correlação das amostras como foi explicado no Capítulo IV. Os resultados mostram que o intervalo de confiança que os valores estimados possui um desvio padrão bem pequeno e que ficaram próximos dos seus valores exatos.

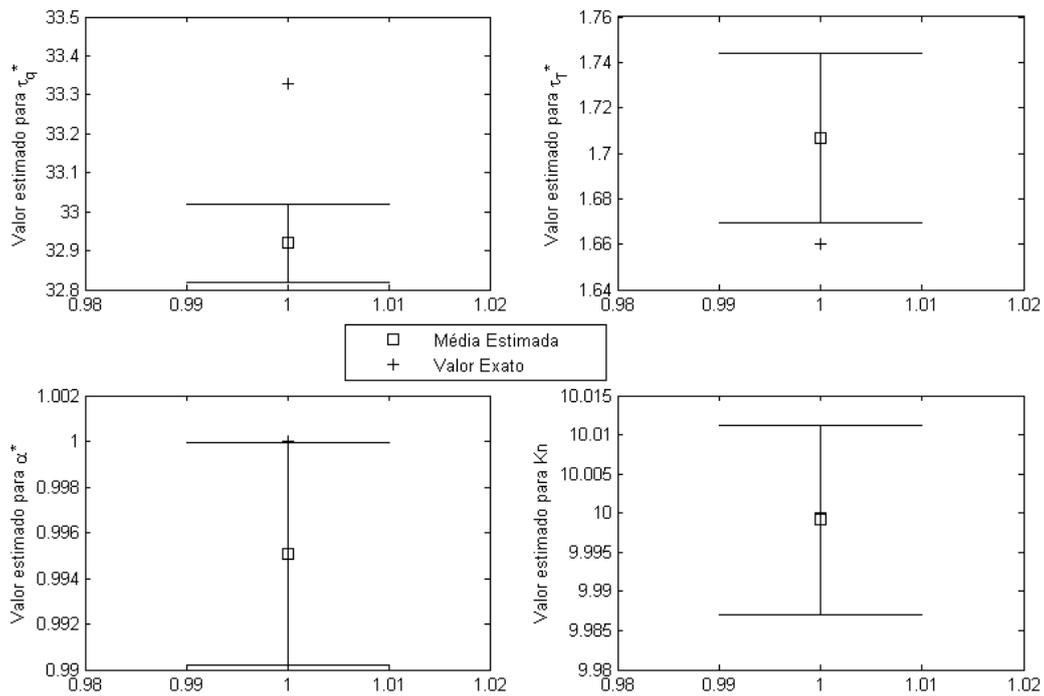


Figura 7.24: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 3

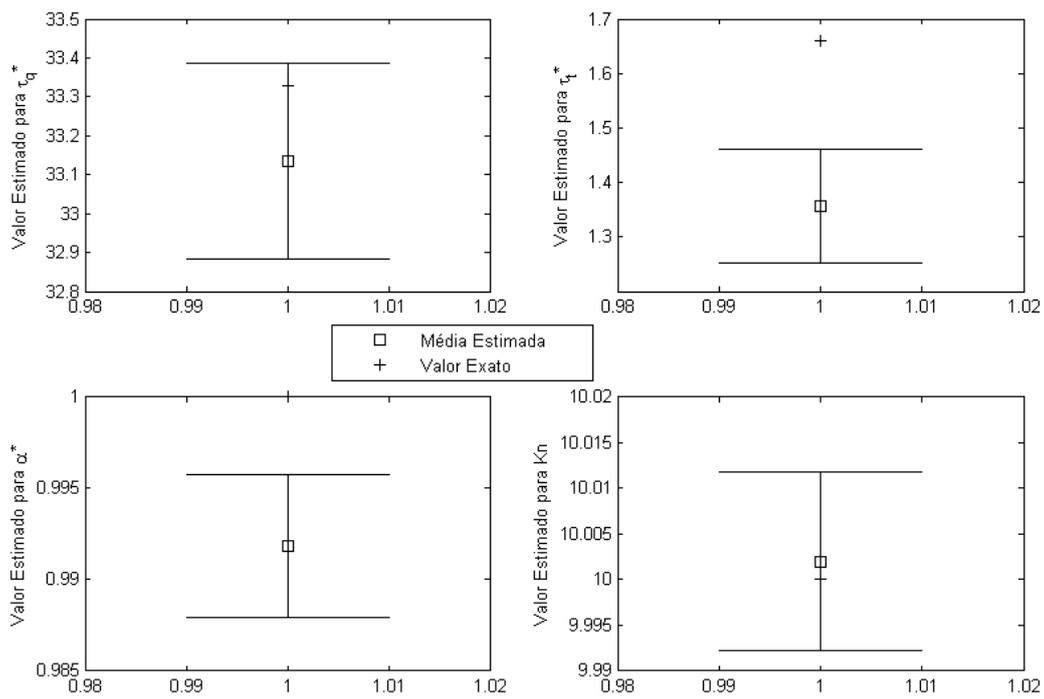


Figura 7.25 Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 4

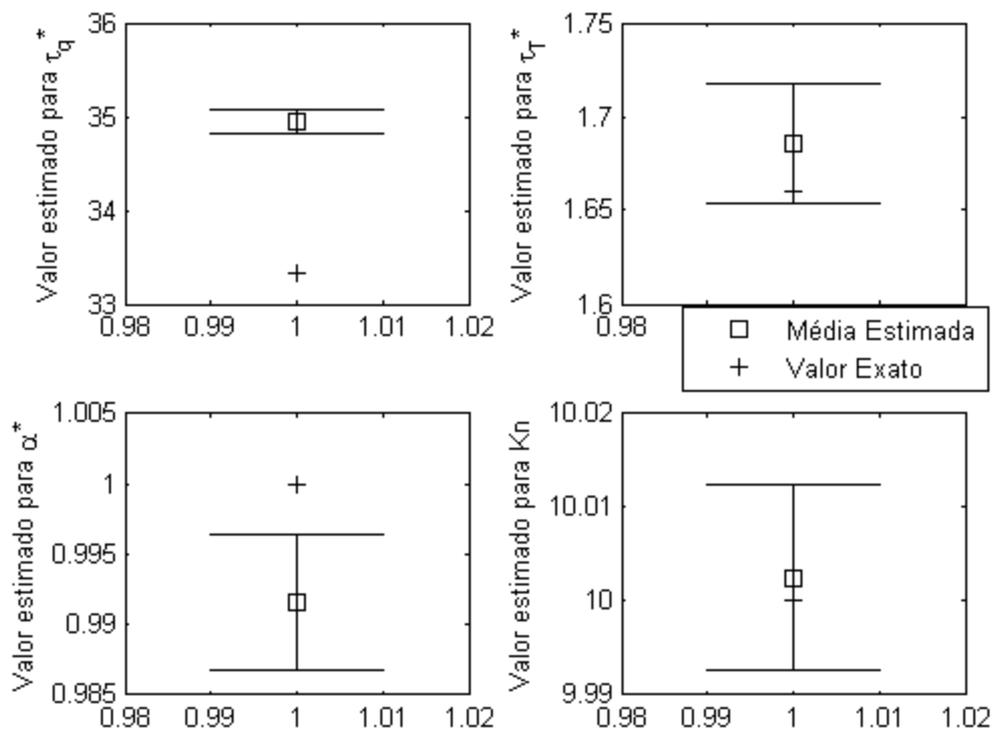


Figura 7.26: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 5

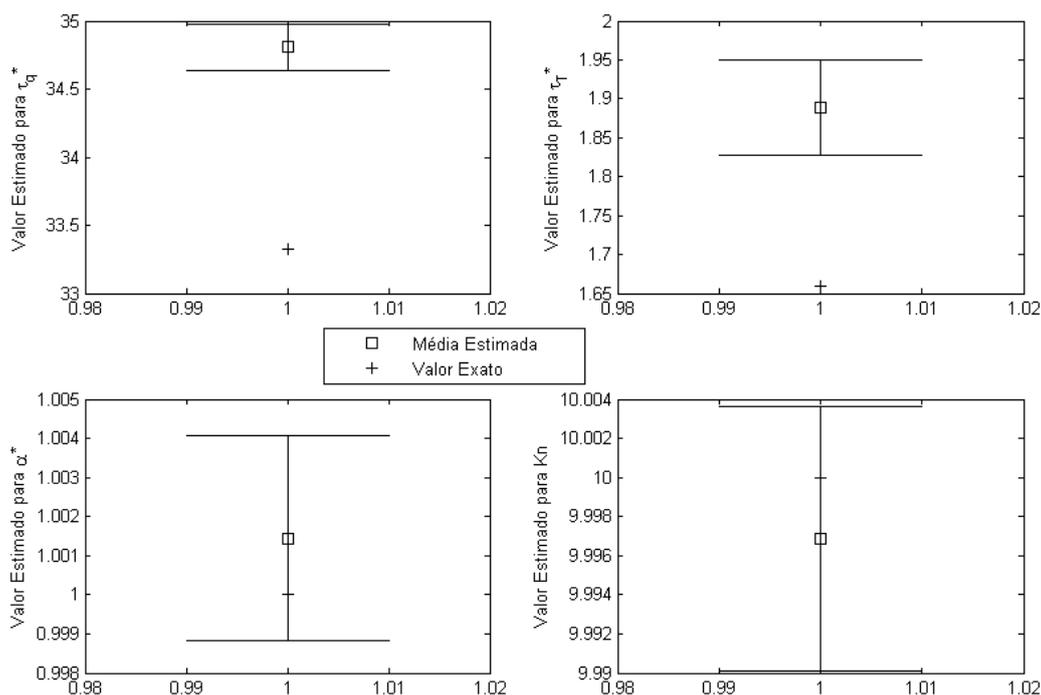


Figura 7.27: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 6

O equilíbrio das cadeias de Markov geradas pelo algoritmo Metropolis-Hastings também permite quantificar as incertezas da solução do problema direto sob os efeitos das incertezas dos parâmetros. Sendo assim, a solução do problema foi obtida os parâmetros de cada estado da cadeia de Markov depois que as cadeias atingiram o seu equilíbrio para comparar com as medidas simuladas e com a variação da temperatura exata na posição de medida.

As Figuras 7.28 – 7.31 apresentam uma comparação das soluções do problema direto obtidas com parâmetros exatos (representadas pelas linhas pontilhadas), com as médias estimadas (representadas pelas linhas com a cruz), pela solução média de todas as soluções geradas pelos estados das cadeias de Markov sem os estados de aquecimento (representadas pelas linhas cheias), as soluções obtidas pelos intervalos de credibilidade (representadas pelas linhas tracejadas) e as suas medidas simuladas (representadas pelos círculos) para os casos 3

a 6. Estas figuras mostram as soluções obtidas com as médias estimadas e aquelas obtidas através dos seus intervalos de 99% de credibilidade. Além disto, mostram as curvas das soluções com os parâmetros exatos para cada caso, a média de todas as soluções de todos os estados das cadeias de Markov e também as medidas simuladas de cada caso. A análise das Figuras 7.28-7.31 revela que os parâmetros obtidos pelas cadeias de Markov promovem soluções de Monte Carlo do problema direto com uma média em excelente concordância com a solução exata e com variâncias muito menores do que aquelas das medidas simuladas. E, portanto, as incertezas associadas à solução do problema direto resultante das incertezas dos parâmetros (representados pelas suas distribuições marginais a posteriori) são menores que aquelas das medidas para a condução de calor do problema com o MCDR em transistores do tipo MOSFET.

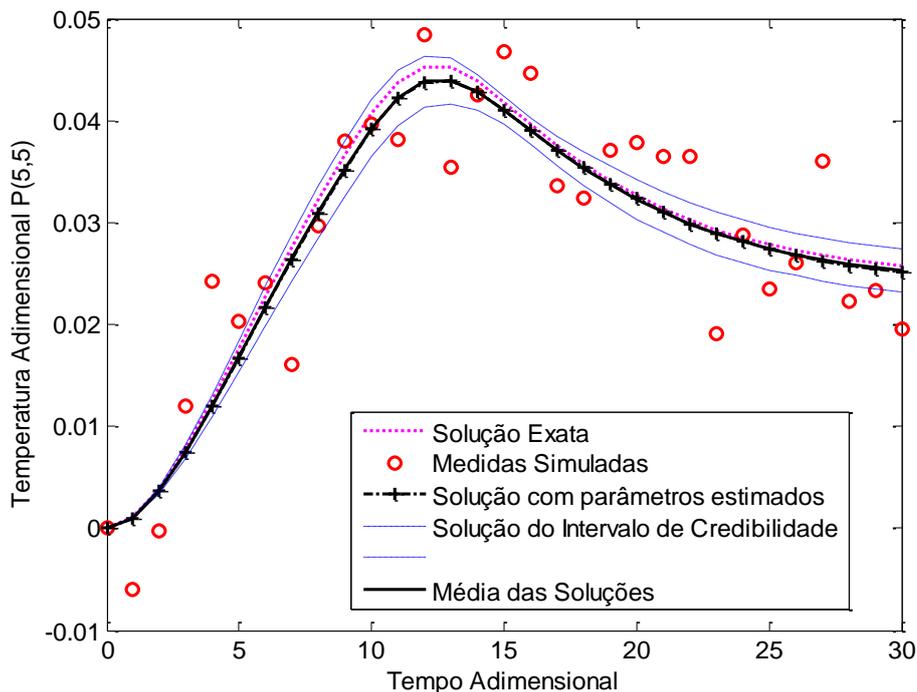


Figura 7.28: Comparação das Soluções obtidas pelos parâmetros exatos, parâmetros estimados, média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 3

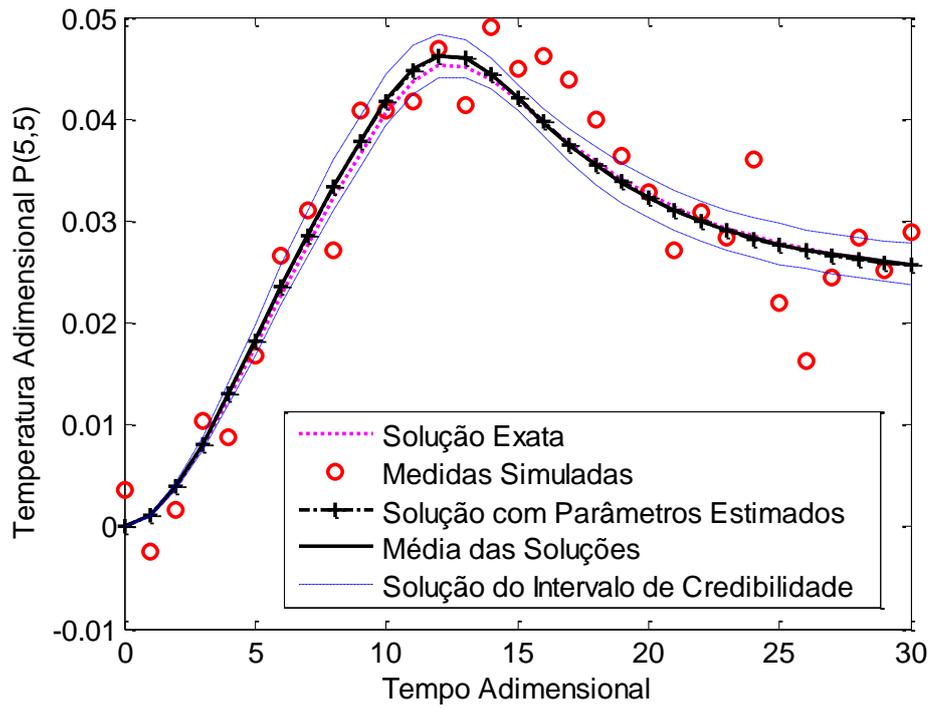


Figura 7.29: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 4

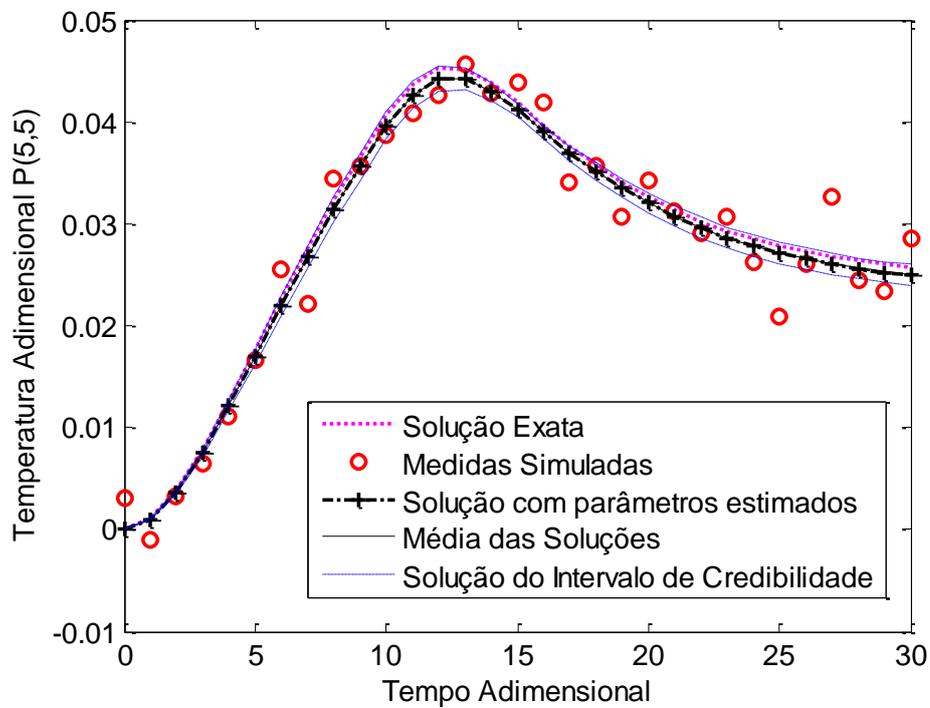


Figura 7.30: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 5

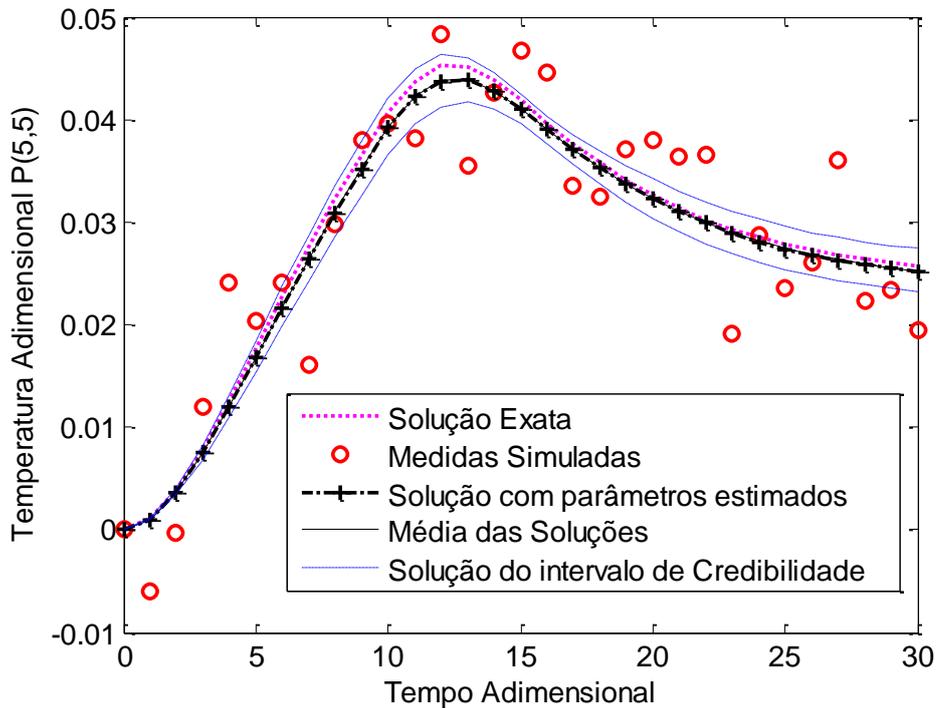


Figura 7.31: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 6

Uma vez estimados os tempos de relaxação do MCDR através do uso de Problemas Inversos via Inferência Bayesiana podemos ter uma estimativa indireta dos tempos de relaxação do modelo de espalhamento de fônons, através das relações destes parâmetros através das relações apresentadas na Tabela 2.1. A Tabela 7.4 apresenta a estimativa dimensional dos parâmetros do MCDR enquanto a Tabela 7.5 apresenta a estimativa indireta dimensional dos parâmetros MEF para cada caso apresentado com os devidos limites inferior e superior do intervalo de credibilidade.

Tabela 7.4- Estimativa dimensional dos parâmetros do MCDR para os casos 1 – 6.

Casos	$LI(ps)$	$\tau_q(ps)$	$LS(ps)$	$LI(ps)$	$\tau_T(ps)$	$LS(ps)$
1	28,56	34,05	38,60	0,64	1,86	2,86
2	31,83	33,05	33,89	1,34	1,62	1,80
3	31,04	32,92	35,00	1,24	1,71	2,17
4	29,60	33,13	37,00	0,62	1,36	2,16
5	32,76	34,94	37,22	1,21	1,69	2,18
6	30,81	34,81	39,19	1,06	1,89	2,84

Tabela 7.5- Estimativa indireta dimensional dos parâmetros do MEF para os casos 1 – 6.

Casos	$LI(ps)$	$\tau_R(ps)$	$LS(ps)$	$LI(ps)$	$\tau_N(ps)$	$LS(ps)$
1	28,56	34,05	38,60	0,36	1,03	1,59
2	31,83	33,05	33,89	0,75	0,90	0,99
3	31,04	32,92	35,00	0,69	0,95	1,21
4	29,60	33,13	37,00	0,35	0,754	1,20
5	32,76	34,94	37,22	0,67	0,94	1,21
6	30,81	34,81	39,19	0,59	1,05	1,58

A Tabela 7.6 apresenta os casos 7 a 10 para a estimativa simultânea dos tempos de relaxação do MCDR, descrevendo as *prioris* utilizadas para cada parâmetro, as estimativas iniciais, desvio padrão das medidas e o tempo computacional.

Nos casos 7 e 8 uma *priori* não informativa foi atribuída para o parâmetro Kn, já que este apresenta um coeficiente de sensibilidade baixo e que, portanto não influencia na

estimação dos parâmetros dos tempos de relaxação. A *priori* atribuída para o Kn foi uma distribuição uniforme nos intervalos $1 < Kn < 100$. Nos casos 9 e 10 o problema direto foi resolvido com a fonte do tipo 2 e para o problema inverso uma *priori* não informativa foi atribuída para os tempos de relaxação enquanto que para a difusividade térmica e o número de Knudsen, foram atribuídas *prioris* Gaussianas.

Analisando conjuntamente os casos 7 e 8, as estimativas iniciais das cadeias para os tempos de relaxação e para a difusividade térmica foram mantidas constantes e apenas a estimativa inicial do número de Knudsen que 8 foi alterada. Para estes casos não houve variação do desvio padrão das medidas simuladas.

Analisando conjuntamente os casos 9 e 10, as estimativas iniciais das cadeias para todos os parâmetros foram mantidas constantes. Quando ao desvio padrão das medidas simuladas, variou-se de 5% para 10% do valor máximo da temperatura adimensional do caso 9 e 10 respectivamente.

Em todo os casos apresentados na Tabela 7.6 foram utilizados 30 mil estados da cadeia de Markov nestas análises considerando um período de aquecimento de 5 mil estados.

Tabela 7.6- Casos analisados 7 a 10

Casos	Parâmetros	<i>Prioris</i>	Estimativa Inicial	Desvio Padrão das Medidas Simuladas	Tempo Computacional (h)
7	τ_q^*, τ_T^* e Kn	Uniforme	10, 10 e 5	$0.05T_{\max}^*$	7.34
	α^*	Gaussiana	1		
8	τ_q^*, τ_T^* e Kn	Uniforme	10, 10 e 20	$0.05T_{\max}^*$	7.50
	α^*	Gaussiana	1		
9	τ_q^* e τ_T^*	Uniforme	50.5 e 50.5	$0.05T_{\max}^*$	7.20
	α^* e Kn	Gaussiana	1 e 10		
10	τ_q^* e τ_T^*	Uniforme	50.5 e 50.5	$0.1T_{\max}^*$	7.35
	α^* e Kn	Gaussiana	1 e 10		

A Tabela 7.7 apresenta os resultados das estimativas para os casos da Tabela 7.6, onde a média estimada é a média da cadeia de Markov sem os estados de aquecimento. Os parâmetros foram estimados com um intervalo com um nível de 99% de credibilidade (0,5% e 99,5% quantis) da distribuição marginal posteriori obtidas através das amostras simuladas das cadeias de Markov. Em geral, as médias estimadas estão em excelente acordo com os valores exatos dos parâmetros. Além disto, os intervalos de credibilidade não foram afetados significativamente pelo ponto de partida das cadeias do parâmetro Kn (nos casos 7 e 8) ou pelo desvio padrão das medidas simuladas, que foram de 5% (casos 7 e 8) e 10% (casos 9 e

10) do valor da máxima temperatura. Observa-se que os parâmetros foram estimados e que seus valores exatos estão dentro dos intervalos de credibilidade.

Tabela 7.7 Resultados da estimação de parâmetros via problemas inversos para os casos apresentados na Tabela 7.6

Casos	Parametro Adimensional	Valor Exato Adimensional	Passo de Procura	Média Estimada	Desvio Padrão das Cadeias	Intervalo de Credibilidade	
						LI	LS
7	τ_g^*	33,330	0,0900	32,5155	1,1941	30,6009	34,5271
	τ_t	1,660	0,0900	1,4991	0,2655	1,0728	1,9369
	α^*	1,000	0,0900	0,9889	0,0490	0,9089	1,0682
	Kn	10,000	0,0010	5,1963	0,1420	4,8800	5,3734
8	τ_g^*	33,330	0,1000	33,4852	1,2255	31,5079	35,5023
	τ_t	1,660	0,0700	1,3856	0,2340	1,0154	1,7717
	α^*	1,000	0,0700	1,0051	0,0475	0,9259	1,0826
	Kn	10,000	0,0010	20,2392	0,5556	19,4538	21,2748
9	τ_g^*	33,330	0,0800	32,2580	2,0117	29,1279	35,6629
	τ_t	1,660	0,1400	1,5916	0,4445	0,9530	2,3892
	α^*	1,000	0,1000	0,9931	0,0498	0,9110	1,0739
	Kn	10,000	0,0100	9,9989	0,1035	9,8337	10,1699
10	τ_g^*	33,330	0,1000	32,5706	1,0168	30,9802	34,2809
	τ_t	1,660	0,0100	1,5515	0,2516	1,1166	1,9520
	α^*	1,000	0,0100	0,9780	0,0488	0,8975	1,0627
	Kn	10,000	0,0010	10,0336	0,1139	9,8397	10,2262

As Figuras 7.32 – 7.35 mostram as cadeias de Markov para os quatro parâmetros e seus respectivos valores exatos (representados por uma linha branca) para os casos 7 a 10 respectivamente, que são aqueles com maior desvio padrão nas medidas simuladas.

Percebe-se nas Figuras 7.32 e 7.33 que as cadeias dos parâmetros dos tempos de relaxação tornam-se estacionárias em torno de seus valores exatos, não importando se para o parâmetro Kn foi atribuída uma *priori* uniforme. A rápida convergência das amostras geradas com o algoritmo Metropolis-Hastings pode ser observada nestas figuras, exceto para a cadeia do Kn . As cadeias de Markov do parâmetro Kn , das Figuras 7.32 e 7.33 não convergem em torno dos seus valores exatos já pelo fato de que seu coeficiente de sensibilidade possui uma baixa sensibilidade. Nestes casos, além de ter sido atribuída uma *priori* uniforme, onde não

há uma região de maior probabilidade para o valor do parâmetro foram utilizados passos de procura pequenos e por isto estas cadeias oscilam apenas em torno da estimativa inicial da cadeia.

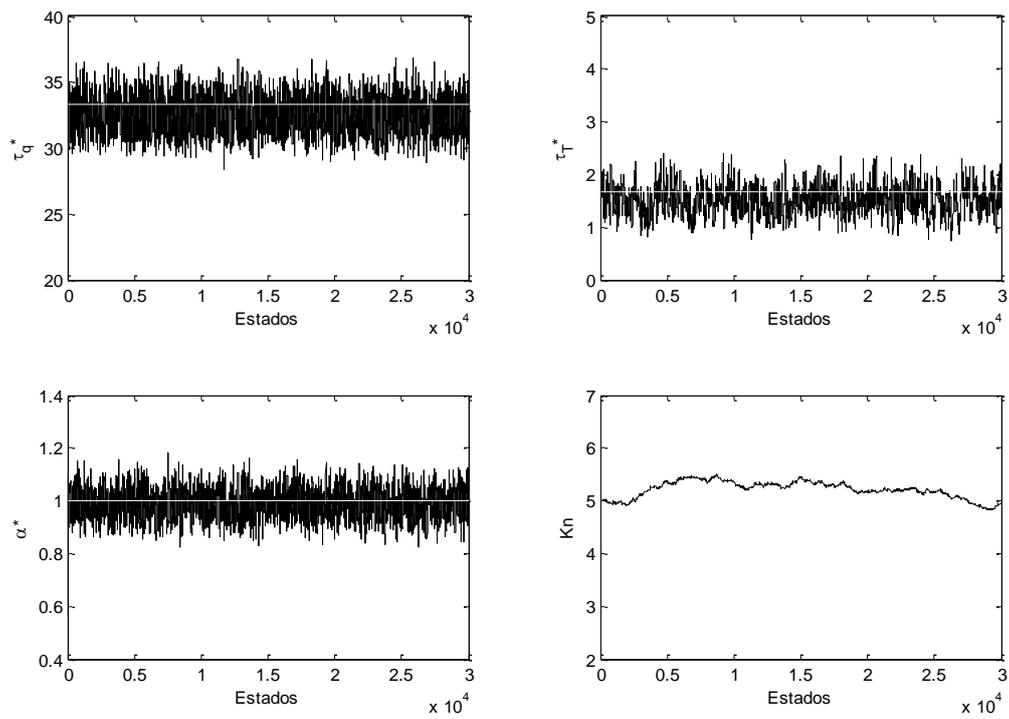


Figura 7.32: Cadeias de Markov– Caso 7

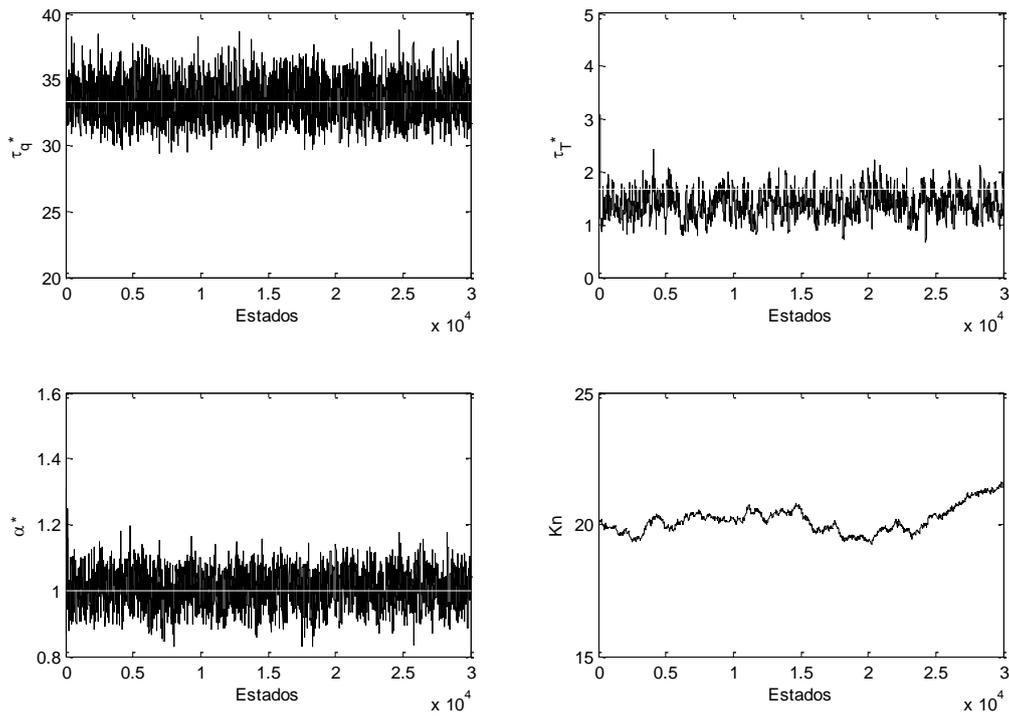


Figura 7.33: Cadeias de Markov– Caso 8

Para os casos 9 e 10, como mostram as Figuras 7.34 e 7.35, as cadeias dos parâmetros dos tempos de relaxação, assim como as demais, tornam-se estacionárias em torno de seus valores exatos. Contudo, as cadeias dos tempos de relaxação levam um tempo maior para atingir a convergência, o que é refletido na função do autocovariância cruzada entre os parâmetros para ambos os casos (ver Figuras 7.41 e 7.42). São apresentados para as cadeias de markov do tempo de relaxação devido ao gradiente de temperatura, nas Figuras 7.34 e 7.35, uma aproximação da cadeia em torno do seu valor exato.

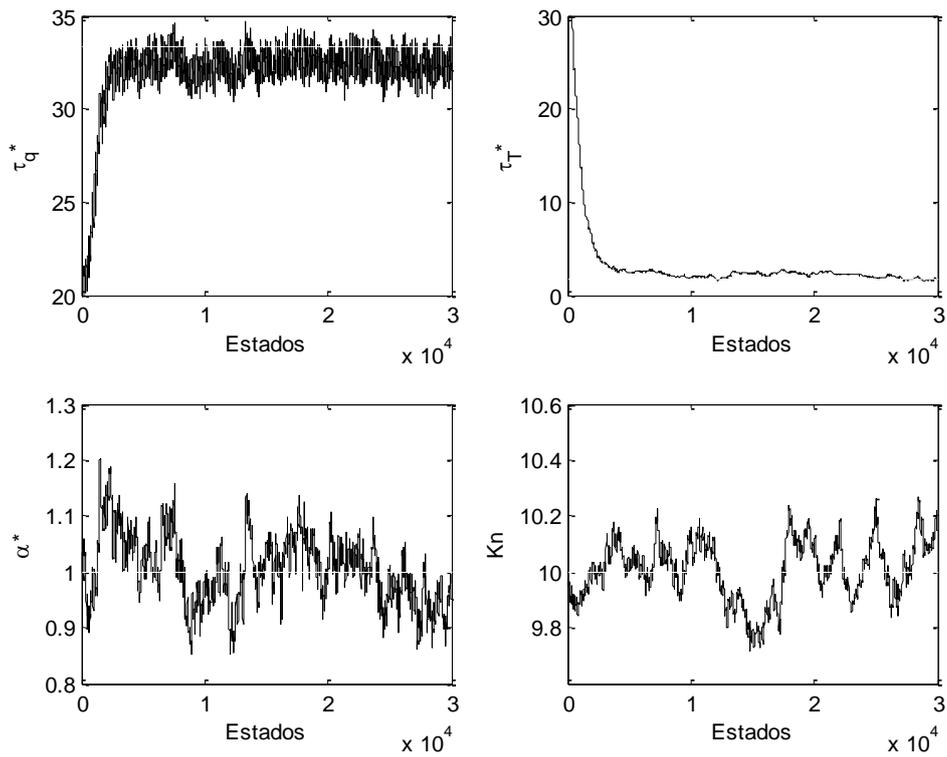


Figura 7.34: Cadeias de Markov para o Caso 9

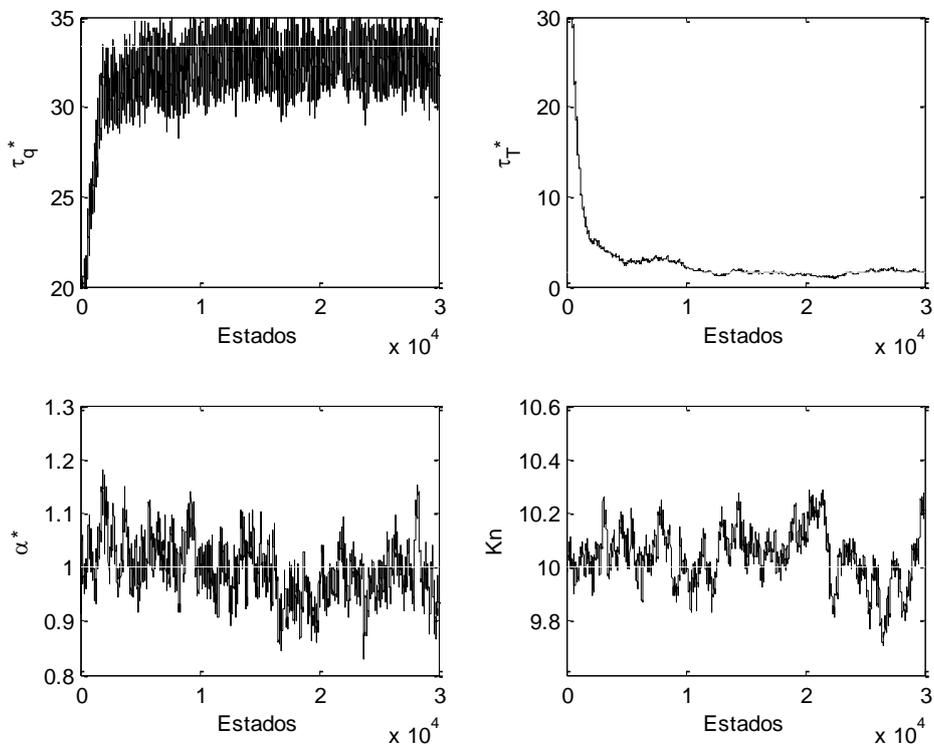


Figura 7.35: Cadeias de Markov para o Caso 10

As Figuras 7.36 – 7.39 ilustram a distribuição marginal posteriori representada por histogramas para cada parâmetro dividido pelo seu valor exato para os casos 7 a 10 respectivamente. Percebe-se em todas as figuras que os histogramas aproximam-se de distribuições Gaussianas já que a verossimilhança é uma Gaussiana e as *prioris* são Gaussianas ou uniformes, exceto as referentes ao parâmetro K_n que apresenta um comportamento assimétrico.

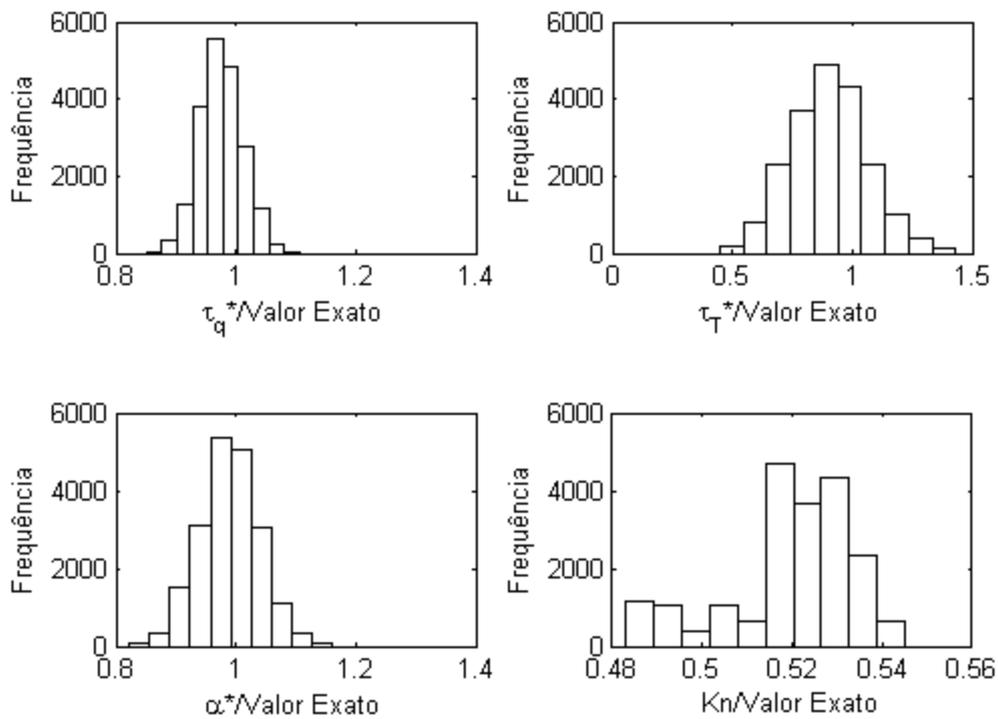


Figura 7.36: Histogramas– Caso 7

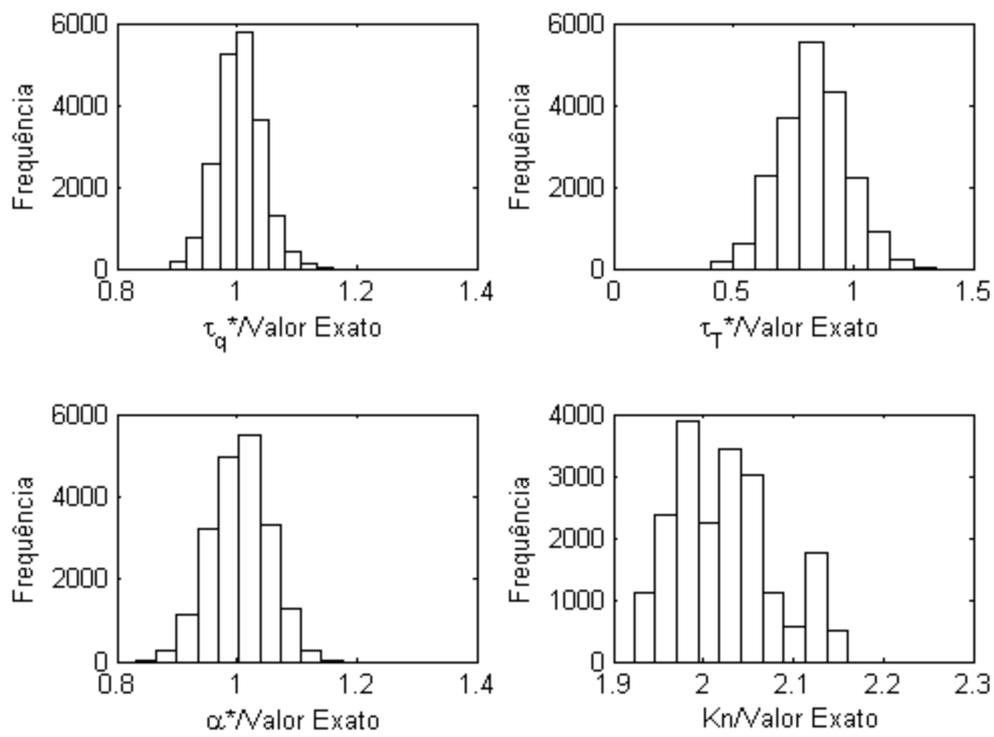


Figura 7.37: Histogramas– Caso 8

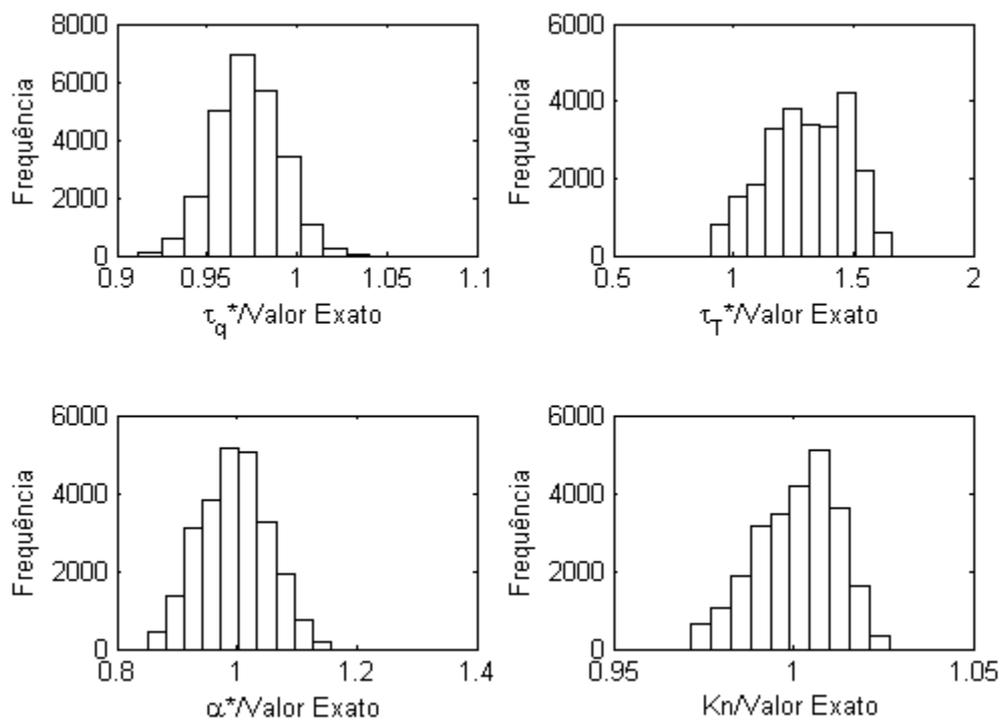


Figura 7.38: Histogramas do Caso 9

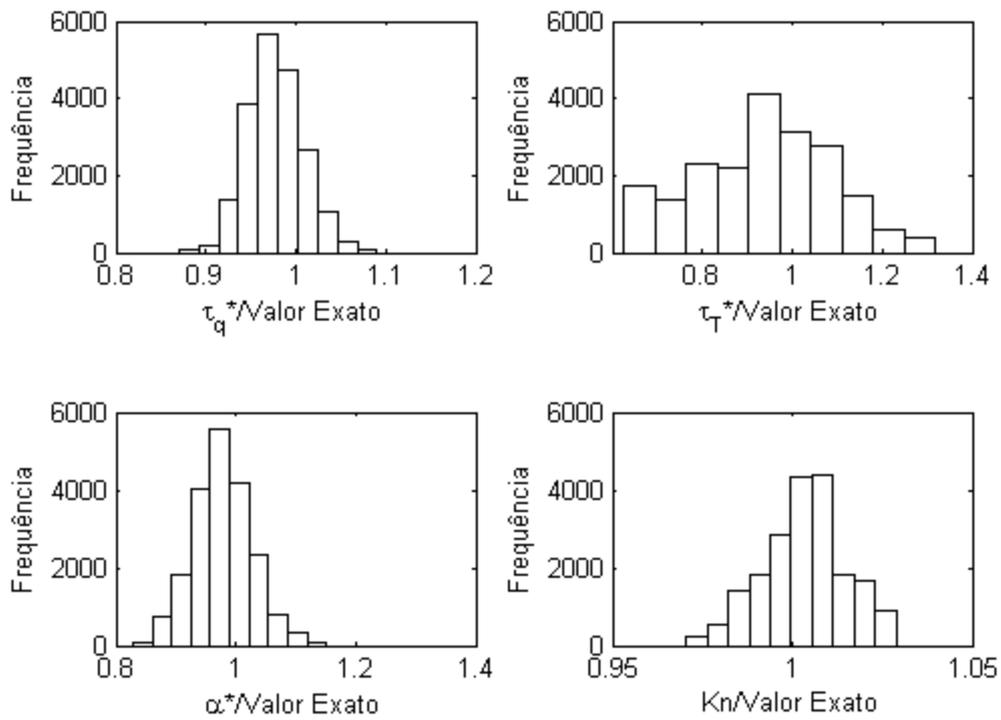


Figura 7.39: Histogramas do Caso 10

As Figuras 7.40 – 7.43 mostram a função de autocovariância normalizada para τ_q^* e τ_T^* e também a função cruzada normalizada de autocovariância entre os mesmos para os casos 7 a 10 respectivamente.

Para os casos 7 e 8 verifica-se através destes gráficos que as cadeias dos tempos de relaxação não são correlacionadas. Enquanto que para os casos 9 e 10 verifica-se que as cadeias possuem uma leve correlação através da função de autocovariância cruzada. Este fato também pode ser observado pelas suas cadeias de Markov (Figuras 7.34 e 7.35).que estas cadeias demoram um pouco mais para convergirem em torno dos seus valores exatos.

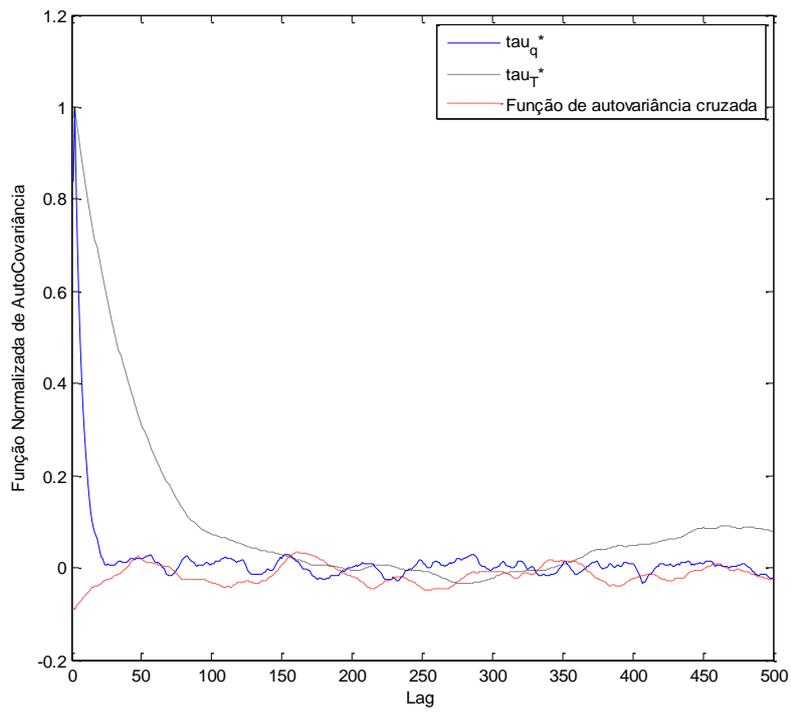


Figura 7.40: Função de Autocovariância– Caso 7

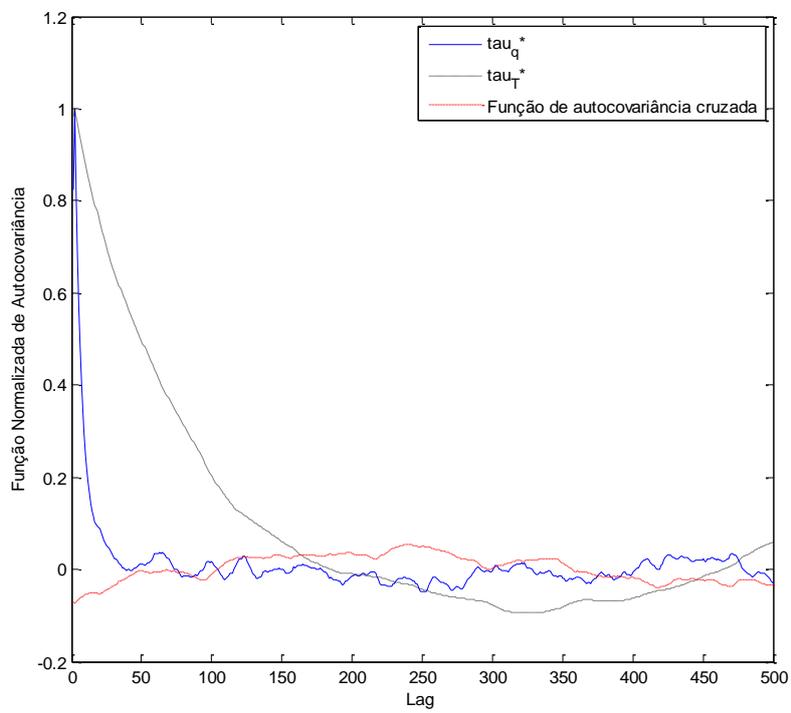


Figura 7.41: Função de Auto covariância– Caso 8

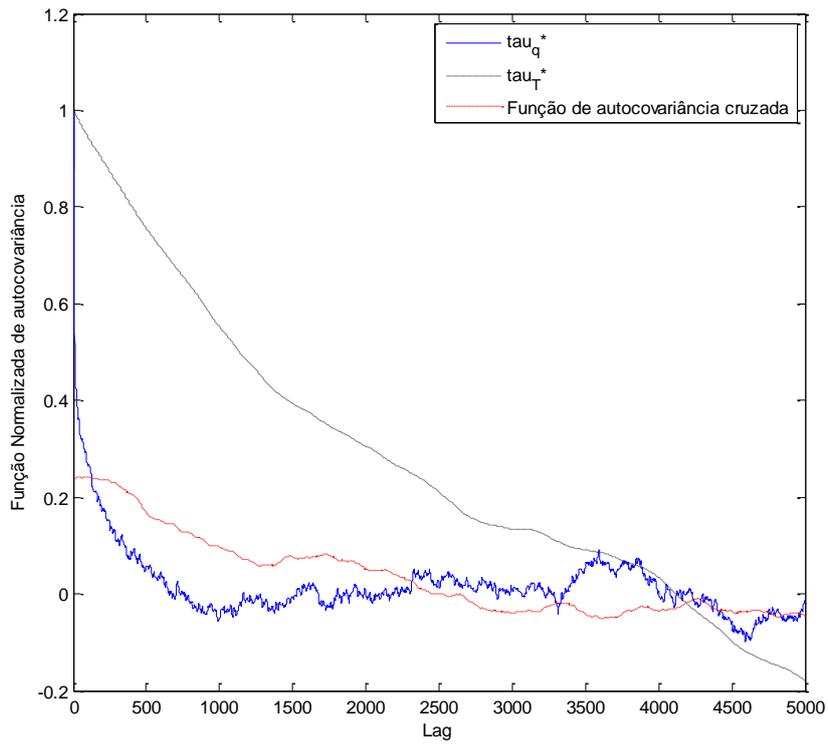


Figura 7.42: Função de Auto covariância– Caso 9

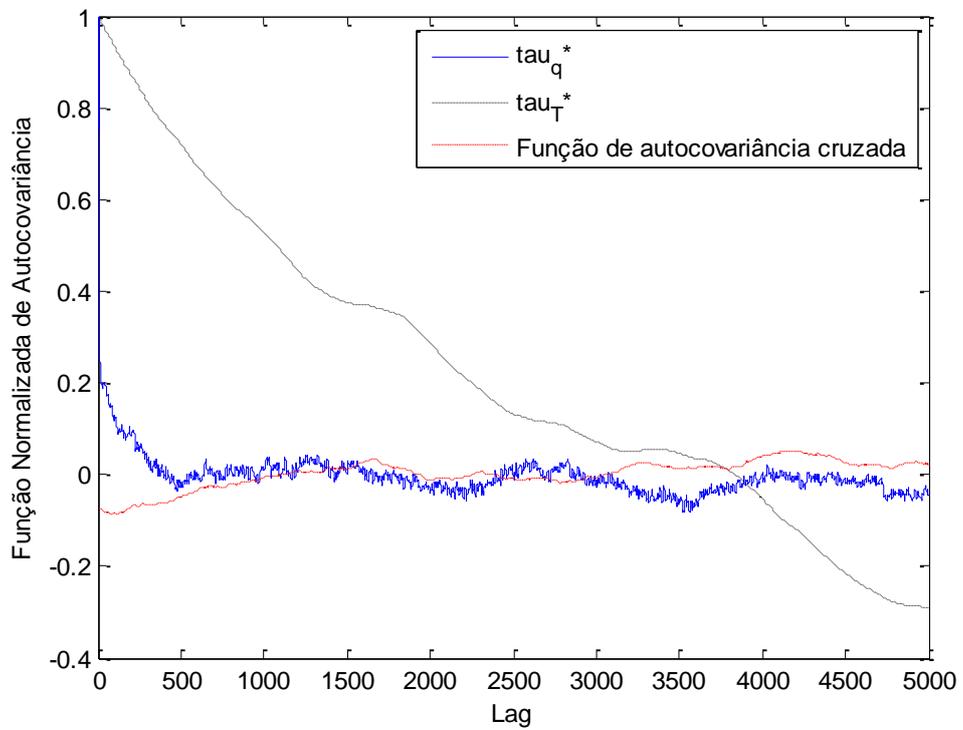


Figura 7.43: Função de Auto covariância– Caso 10

As Figuras 7.44 – 7.47 mostram os intervalos de credibilidade para as médias estimadas e seus valores exatos de acordo com os valores presentes na Tabela 7.7 para os casos 7 a 10 respectivamente. As figuras mostram que para todos os casos os parâmetros estimados estão em concordância com seus respectivos valores exatos e que suas incertezas são pequenas. É importante notar que estes casos apresentados nas figuras, são casos que possuem uma grande incerteza nas medidas (5% e 10% dos seus valores máximos) e mesmo assim seus parâmetros foram estimados com uma baixa variância.

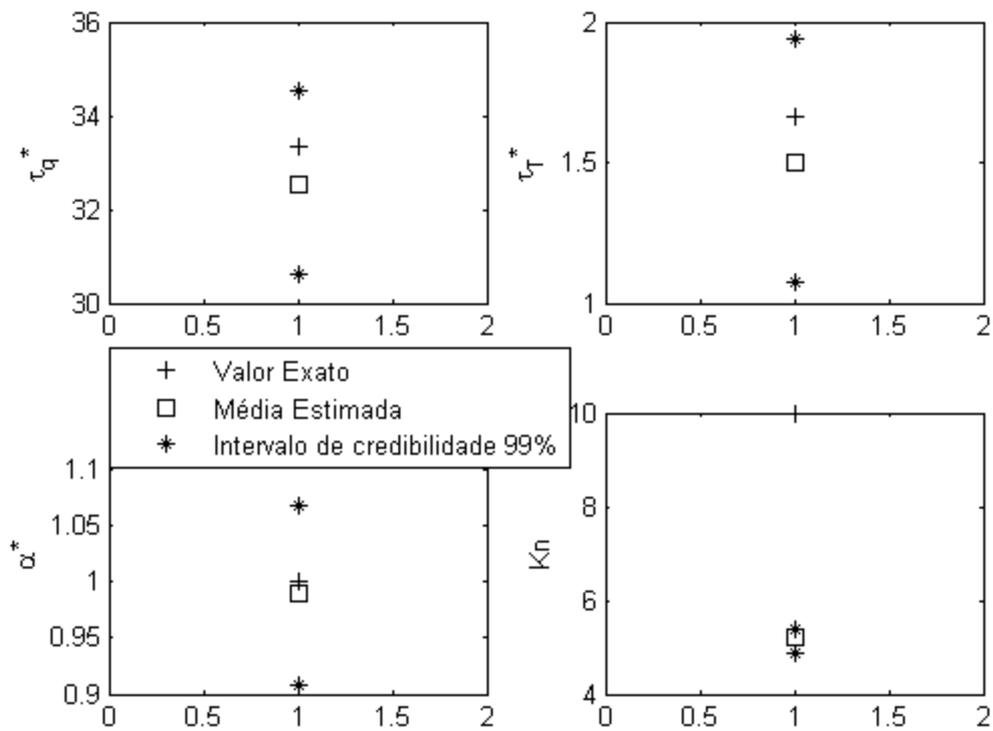


Figura 7.44: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 7

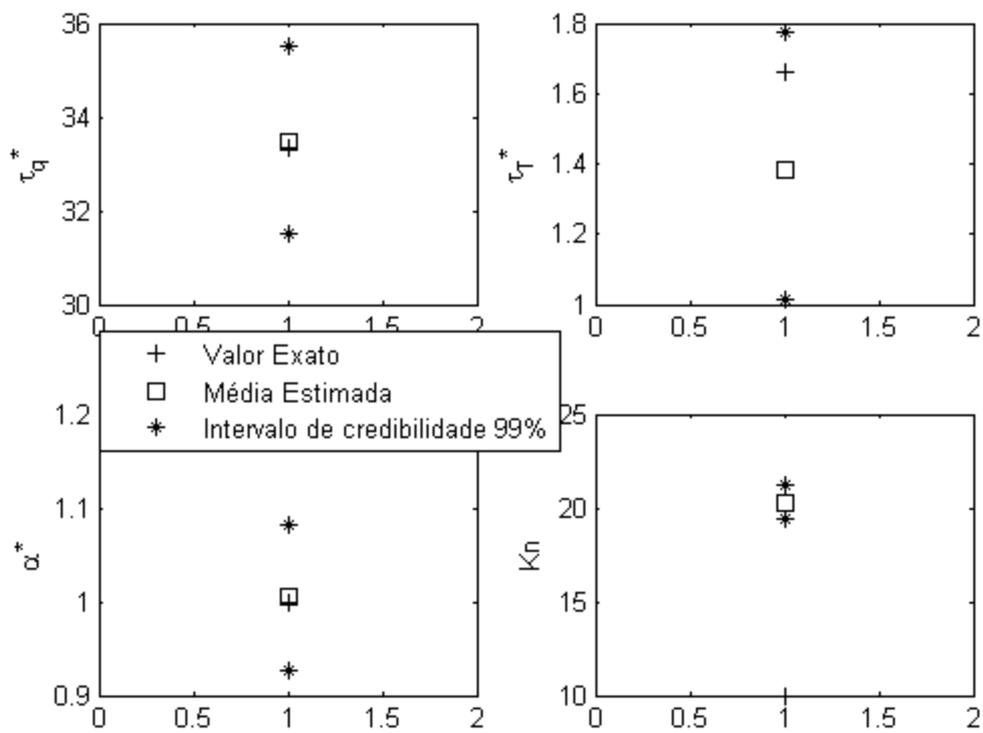


Figura 7.45: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 8

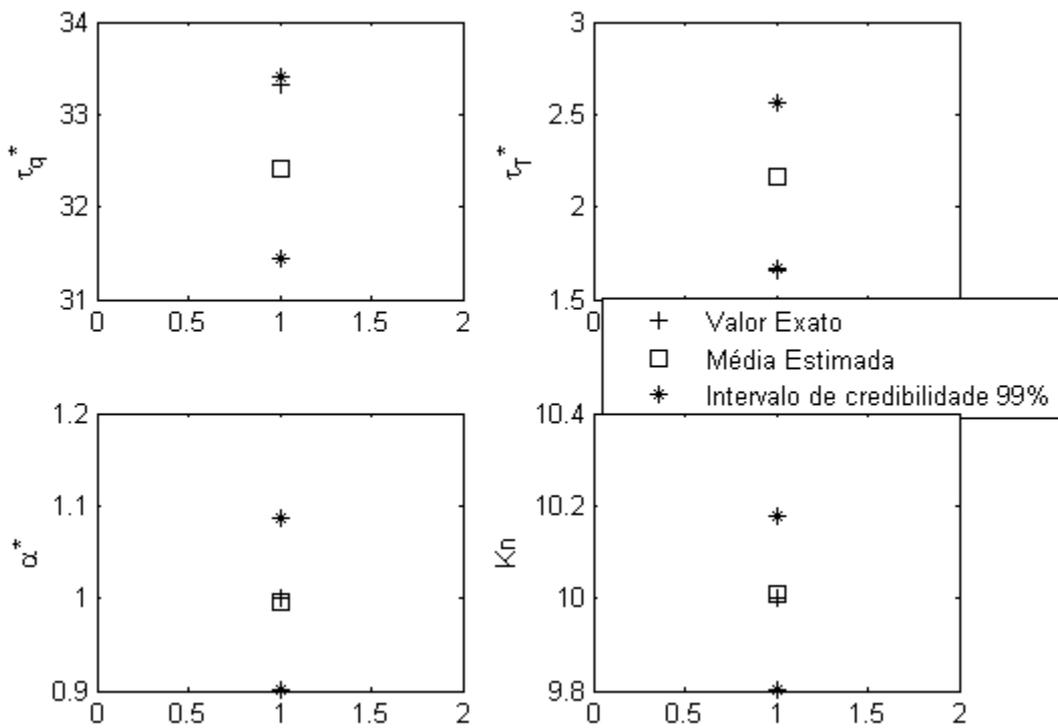


Figura 7.46: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 9

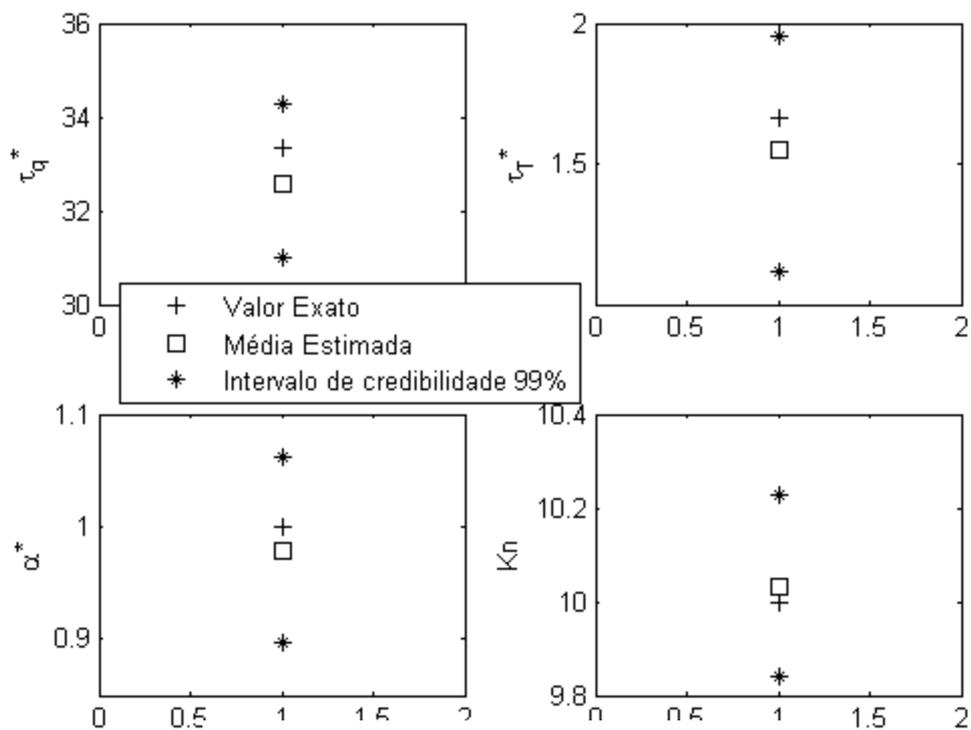


Figura 7.47: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de credibilidade dos parâmetros – Caso 10

As Figuras 7.48- 7.51 mostram os intervalos de confiança das médias das cadeias dos parâmetros para os casos 7 a 10 respectivamente. O intervalo de confiança foi obtido com base no desvio padrão da média, através do cálculo do tempo de auto correlação das amostras como foi explicado no Capítulo IV. Os resultados mostram que o intervalo de confiança que os valores estimados possui um desvio padrão bem pequeno e que ficaram próximos dos seus valores exatos.

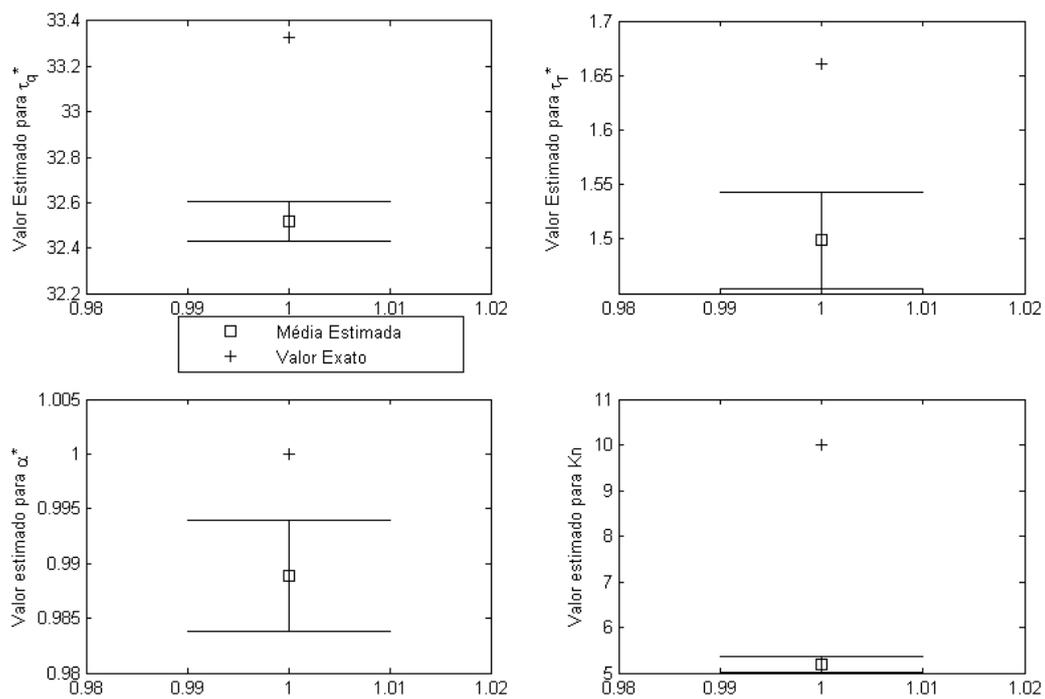


Figura 7.48: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 7

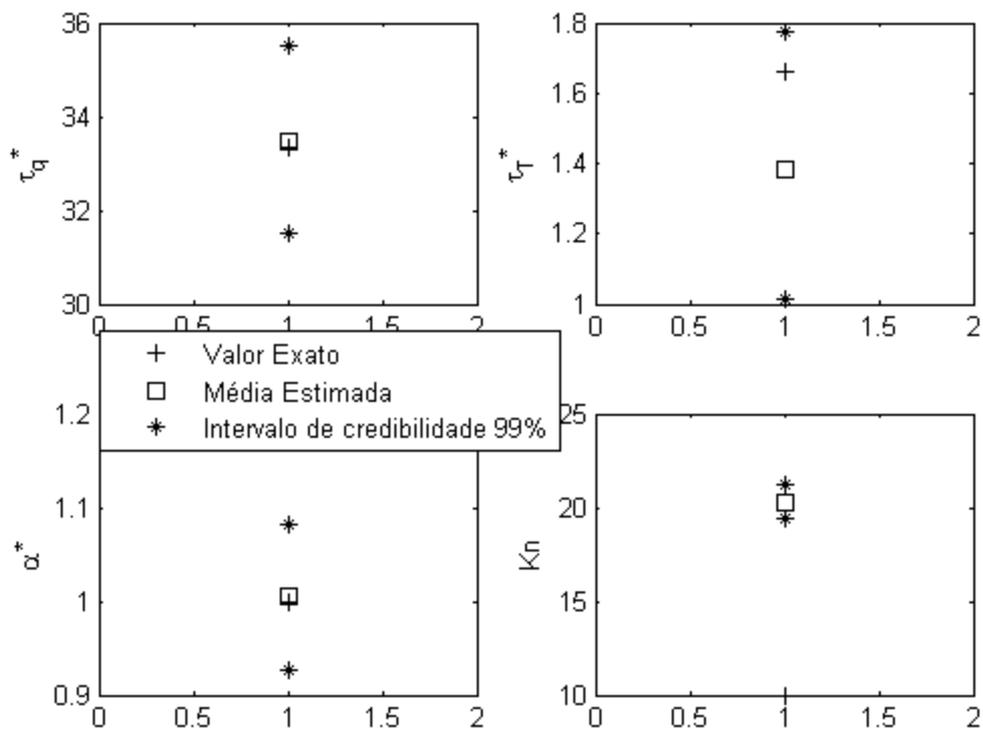


Figura 7.49 Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 8

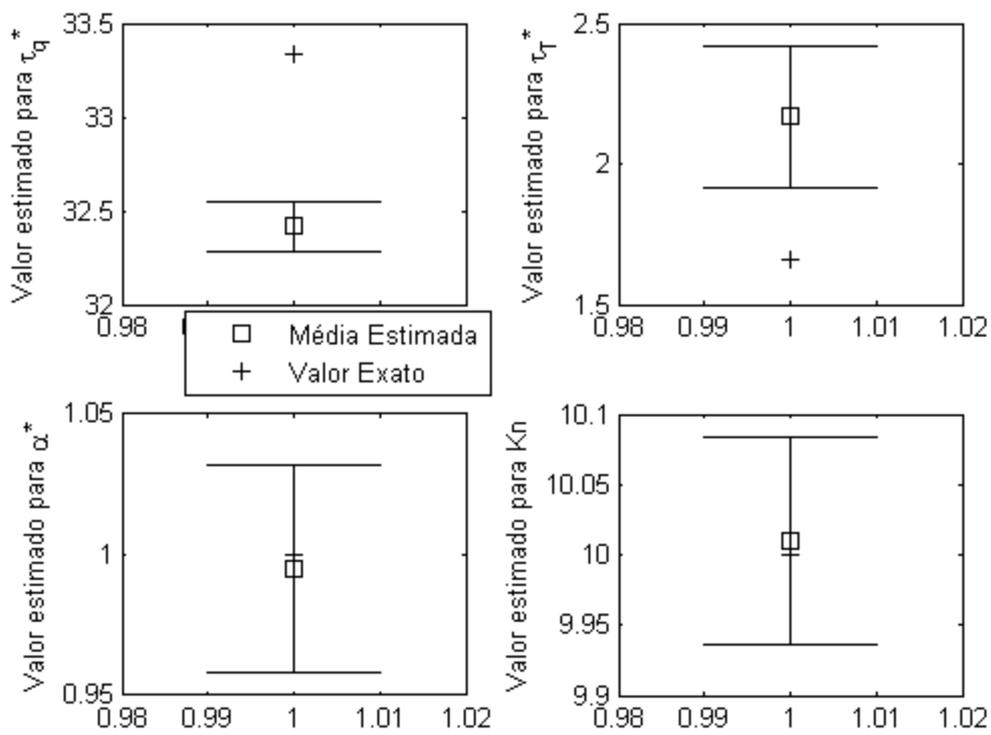


Figura 7.50: Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 9

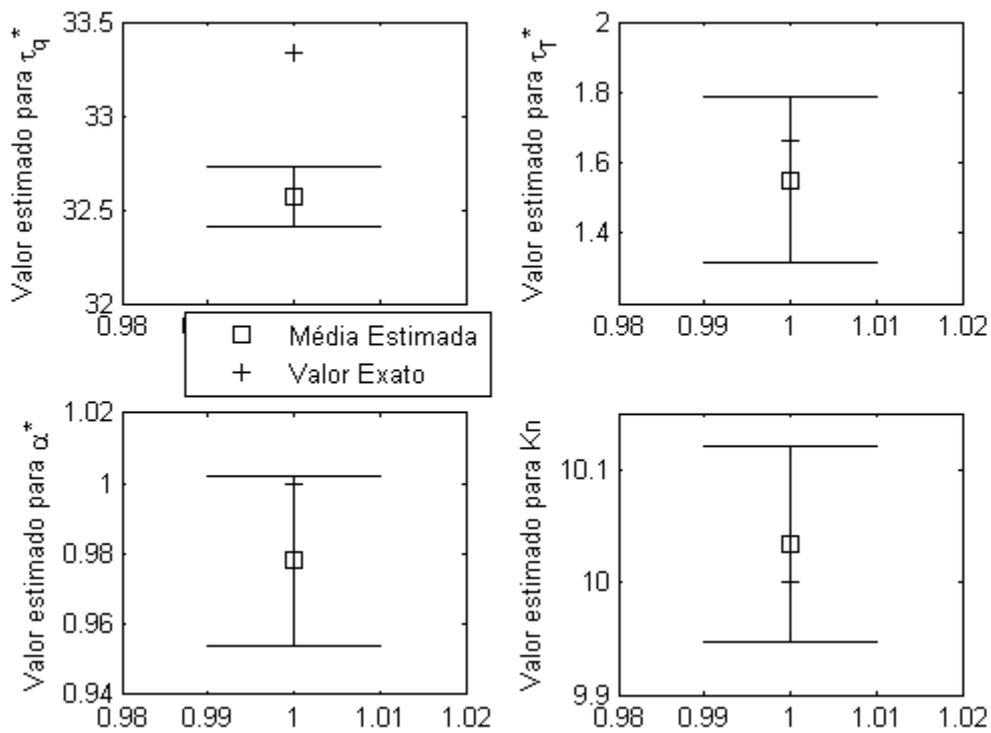


Figura 7.51 Valores exatos, médias estimadas e intervalos de confiança – Caso 10

A mesma análise realizada para os casos 3 a 6 quanto às incertezas da solução do problema direto associadas às incertezas dos parâmetros é realizada para os casos 7 a 10.

A solução do problema foi obtida os parâmetros de cada estado da cadeia de Markov depois que as cadeias atingiram o seu equilíbrio para comparar com as medidas simuladas e com a variação da temperatura exata na posição de medida nos casos 7 a 10

As Figuras 7.52 e 7.55 apresentam esta comparação das soluções obtidas pelos parâmetros exatos, pelas médias estimadas, pela média de todas as soluções geradas pelos estados das cadeias de Markov e também as soluções obtidas pelos intervalos de credibilidade. As soluções obtidas com as médias estimadas são representadas pelas linhas com a cruz e aquelas obtidas através dos seus intervalos de 99% de credibilidade são representadas pelas linhas tracejadas, as curvas das soluções com os parâmetros exatos para cada caso são representadas pelas linhas pontilhadas, a solução média de todas as soluções através de todos os estados das cadeias de Markov são representadas pelas linhas cheias e as medidas simuladas são representadas pelos círculos.

Os resultados mostram que as soluções obtidas para os parâmetros estimados e aquela obtida através da media de todos os estados são bem próximas daquela obtida com os parâmetros exatos e que esta última se encontra dentro das soluções obtidas através dos intervalos de credibilidade.

Portanto, a análise das Figuras 7.52 e 7.55 revela que os parâmetros obtidos pelas cadeias de Markov promovem soluções de Monte Carlo do problema direto com uma média em excelente concordância com a solução exata e com variâncias muito menores do que aquelas das medidas simuladas.

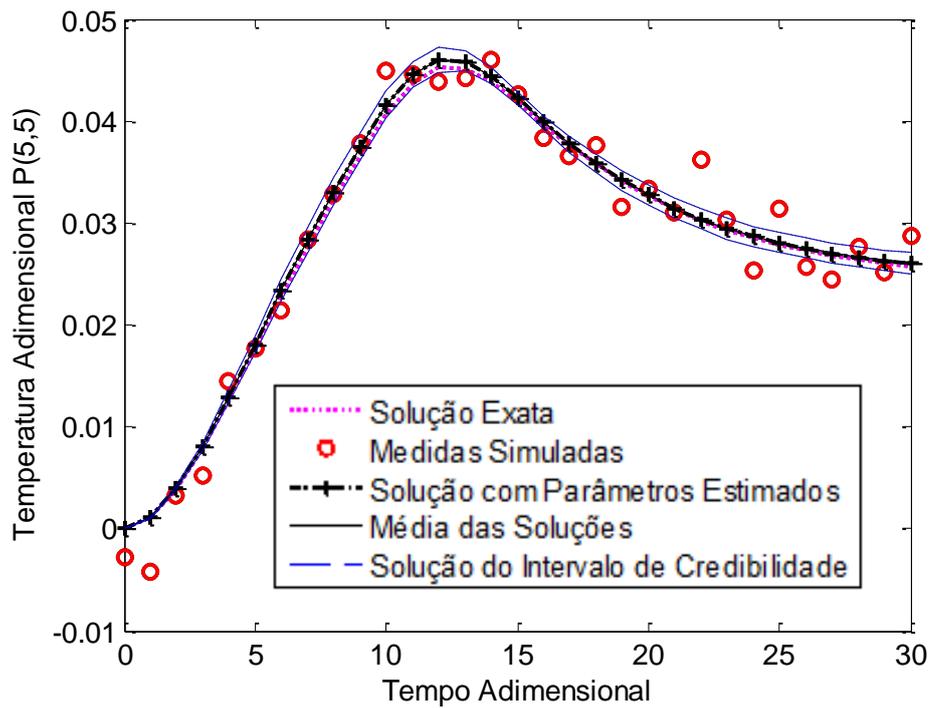


Figura 7.52: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 7

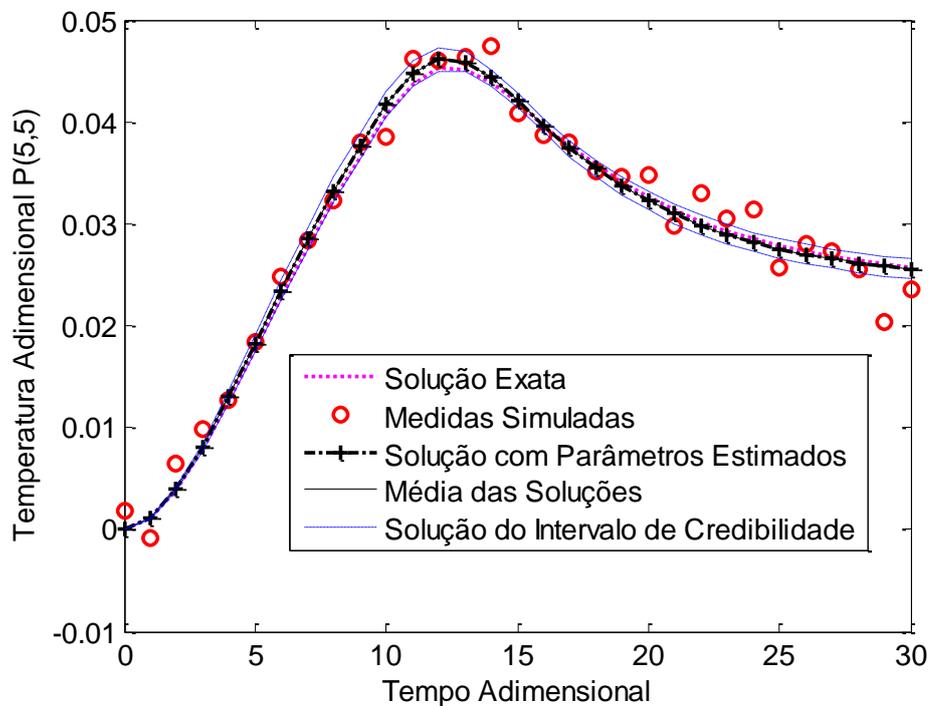


Figura 7.53: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 8

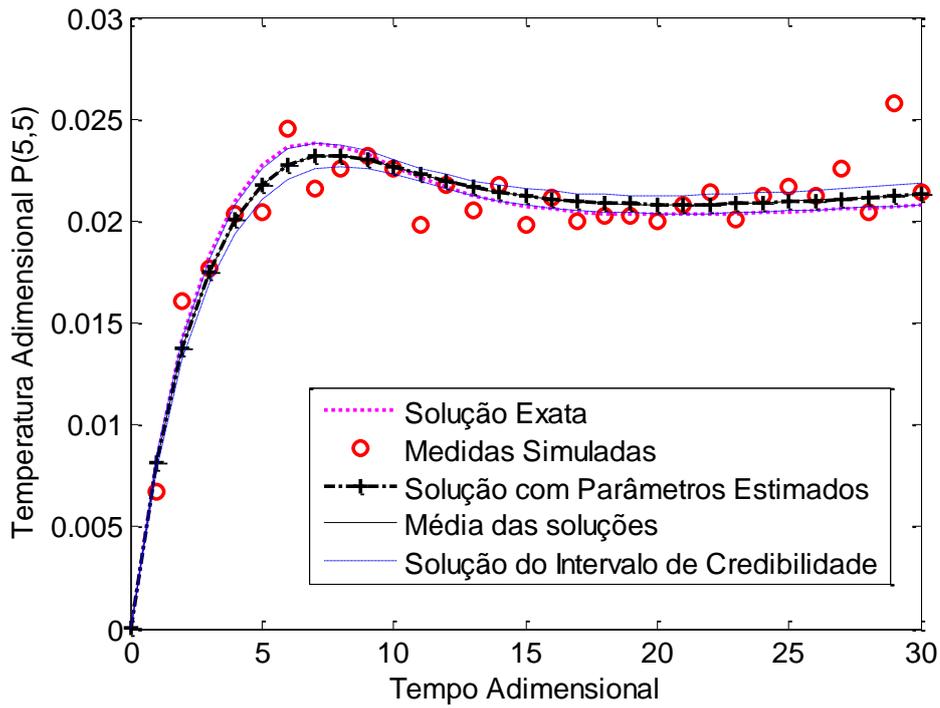


Figura 7.54: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 9

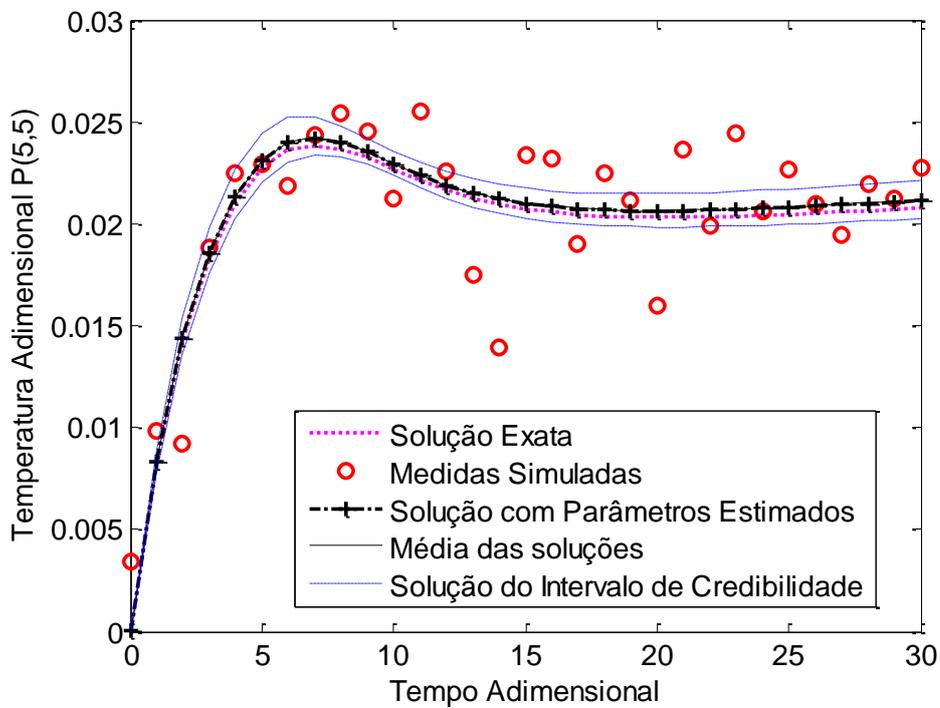


Figura 7.55: Comparação das Soluções obtidas com os parâmetros exatos, com os parâmetros estimados, a solução média dos parâmetros das cadeias de Markov e pelos intervalos de credibilidade dos parâmetros estimados (25 mil estados) – Caso 10

A Tabela 7.8 apresenta as estimativas dimensionais dos parâmetros do MCDR enquanto a Tabela 7.9 apresenta as estimativas indiretas dimensionais dos parâmetros MEF para cada caso apresentado, com os devidos limites inferior e superior do intervalo de credibilidade.

Tabela 7.8- Estimativa dimensional dos parâmetros do MCDR para os casos 7 a 10.

Casos	$LI(ps)$	$\tau_q(ps)$	$LS(ps)$	$LI(ps)$	$\tau_t(ps)$	$LS(ps)$
7	30,60	32,52	34,53	1,07	1,50	1,94
8	31,51	33,49	35,50	1,02	1,39	1,77
9	31,43	32,41	33,39	1,67	2,16	2,56
10	30,98	32,57	34,28	1,11	1,55	1,95

Tabela 7.9- Estimativa indireta dimensional dos parâmetros do MEF para os casos 7 a 10

Casos	$LI(ps)$	$\tau_R(ps)$	$LS(ps)$	$LI(ps)$	$\tau_N(ps)$	$LS(ps)$
7	30,60	32,52	34,53	0,60	0,83	1,08
8	31,51	33,49	35,50	0,56	0,77	0,98
9	29,13	32,25	35,66	0,93	1,20	1,42
10	30,98	32,57	34,28	0,62	0,86	1,08

CAPÍTULO VIII

8. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Neste capítulo são apresentadas as principais conclusões desta tese de doutorado bem como sugestões para trabalhos futuros neste tema.

8.1. Conclusões

A principal contribuição desta tese de doutorado foi a estimativa de parâmetros do MCDR fazendo uso da ferramenta de problemas inversos através de técnica Bayesianas em um problema de condução em um transistor, com dimensões na nanoescala, e com tempos de simulação na ordem de picosegundos, envolvendo uma condição de contorno com salto de temperatura em uma fronteira e com o devido fluxo prescrito que prevê o modelo de duplo retardo, visto que estes são parâmetros inerentes a este modelo e que não podem ser estimados com outros métodos padrões.

Verificou-se a solução numérica obtida através do método de elementos finitos no Comsol, utilizando-se a solução analítica de Ghazanfarian e Abbassi (2012) envolvendo um problema bidimensional sem geração de calor dentro do transistor com outra configuração de condições de contorno. O problema direto utilizado para solução do problema inverso foi um similar àquele encontrado em Ghazanfarian e Shomalli (2012), porém com outra fonte de calor considerando o devido fluxo de calor na parede provindo do MCDR para simular a difusão dos fônons.

Com os problemas diretos resolvidos, partiu-se para a solução do problema inverso com o método MCMC utilizando o algoritmo Metropolis-Hastings. No modelo considerado, as propriedades do silício foram consideradas constantes e não foram levados em contas a relação de dispersão dos fônons (Yang *et al.*, 2005), como também foi utilizado um modelo

de fonte de calor que aborda os aspectos mais gerais que ocorrem em um semicondutor, não levando em conta, portanto tem as trocas de energia dos fônons e elétrons e nem informações espectrais dos fônons. Devido a grande falta de dados experimentais em relação tanto aos parâmetros do modelo de duplo retardo como também do modelo de espalhamento de fônons em semicondutores, foram utilizadas *prioris* pouco informativas sobre os tempos de relaxação deste último modelo para semicondutores (Verdavaz, 1994).

Neste trabalho de estimação via inferência Bayesiana foram utilizadas *prioris* uniformes sobre os parâmetros desejados. As simulações levaram em conta casos com dois tipos de fonte de calor, onde em um deles, além das *prioris* com distribuição uniformes para os tempos de relaxação, utiliza-se uma *priori* com distribuição uniforme também para o K_n . Foram analisados um total de 10 casos e em todos como mostram as figuras e tabelas presentes no Capítulo VII, onde estimaram-se parâmetros referentes aos tempos de relaxação do MCDR e como resultado uma estimativa indireta dos parâmetros do MEF foi realizada para o silício.

Os resultados obtidos através do método MCMC implementado através do algoritmo Metropolis-Hastings mostraram que os parâmetros estimados não são sensíveis aos estados iniciais da cadeia de Markov e nem às incertezas das medidas. As soluções obtidas com os parâmetros estimados ficaram bem próximas da solução utilizando os parâmetros exatos e esta última dentro do intervalo de soluções correspondente ao intervalo com nível de 99% credibilidade da solução utilizando as médias estimadas.

Com os resultados obtidos neste trabalho, além de incluir o fluxo de calor previsto pelo MCDR no contorno com o salto de temperatura, fato que até então para o conhecimento da autora não existe na literatura para este tipo de problema em transistores que envolvam uma condição de contorno com para simular a difusão dos fônons na parede, neste trabalho

demonstrou ser possível o uso da ferramenta de problemas inversos para estimação dos parâmetros do MCDR, bem como a estimação indireta dos tempos de relaxação do MEF através da relação existente entre estes parâmetros. Os resultados revelaram que a simulação de Monte Carlo está em excelente concordância com a solução exata e as variâncias são muito menores que aquelas das medidas. Sendo então, os problemas inversos através de uma abordagem de Inferência Bayesiana uma ferramenta poderosa para estimação dos tempos de relaxação do MCDR.

8.2. Sugestões para Trabalhos Futuros

A obtenção e estimativa dos tempos de relaxação em semicondutores é um campo que ainda oferece vasta pesquisa. Todos os tempos de relaxação em semicondutores (devido aos processos resistivos e não resistivos) são funções complicadas da frequência de vibração e dos grupos de velocidade dos modos de fônons, óticos e acústicos (este último sendo ainda de dois modos: longitudinais e transversais) (Baladin e Wang, 1998).

Para trabalhos futuros recomenda-se utilizar abordagens de deriva difusão, hidrodinâmica e Monte Carlo para a definição da taxa de geração de calor dentro do transistor. As equações 8.1 e 8.2 apresentam as duas primeiras abordagens (Pop,2010):

$$Q = J.E + (R - G)(E_g + 3k_B T) \quad (8.1)$$

$$Q = \frac{3}{2} k_B n \frac{(T_e - T_L)}{\tau_e - L} + (R - G) \left(E_g + \frac{3}{2} k_B (T_e - T_L) \right) \quad (8.2)$$

onde a primeira relação leva em consideração o efeito Joule como também a geração de elétrons e lacunas e aos processos de recombinação dos mesmos. Na segunda relação, a fonte

é função da temperatura dos elétrons e do tempo médio de relaxação do elétron, e lacunas estão em equilíbrio térmicos com a estrutura cristalina.

No entanto o uso do método de Monte Carlo, que é uma simulação atomística, nos fornece informações espectrais a respeito dos fônons. Alguns autores fizeram deste método para modelagem em transistores tal como, Eric Pop (2004).

Portanto, após definir a fonte de alguma destas maneira, pode-se também considerar as propriedades do material dependentes da temperatura (como em Shomalli *et al* 2015 – 1D) e assim fazer uso de modelos teóricos sobre a velocidade e condutividade térmica dos fônons (Ward e Broido, (2010); Henry e Cheng, (2008)) como *prioris* para a obtenção dos tempos de relaxação do modelo de espalhamento de fônons que envolvam informações espectrais sobre os fônons para a estimação dos parâmetros do MCDR em semicondutores.

Desta maneira, é possível utilizar *prioris* mais informativas a respeito dos tempos de relaxação a partir do conhecimento de informações espectrais sobre o transporte de fônons, já que a contribuição de condução de calor maior em semicondutores é devido aos fônons acústicos, para a estimação dos tempos de relaxação através da Inferência Bayesiana. Pode-se ainda utilizar medidas experimentais de temperatura em transistores para a estimação dos tempos de relaxação do material do transistor. Além do transistor do tipo MOSFET, esta metodologia pode ser aplicada a outros tipos de transistores como, por exemplo, do tipo SOIFET, onde no substrato existe uma camada de óxido de silício.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALIFANOV, O.M., 1994. **Inverse Heat Transfer Problems**, Springer-Verlag, New York.
- ANDERSON, C. V. D. R., 2008, **Thermal Heat Transport Characterization for Macroscale, Microscale and Nanoscale Heat Conduction**, Tese de Doutorado, University of Minnesota
- ANISIMOV, B. L. KAPELIOVICH, e T. L. PEREL'MAN, 1973. "Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses", **Zh. Eksp. Teor. Fiz.** 66, 776-781.
- ASHCROFT, N. W. e MERMIN, N. D., 1976. **Solid State Physics**. W. B. Saunders, Philadelphia.
- ASME V&V 20, 2009. "Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer", **The American Society of Mechanical Engineers**, Three Park Avenue, New York, NY.
- BAI, C. e LAVINE, A. S., 1995, "On Hyperbolic Heat Conduction and the Second Law of Thermodynamics". **J. Heat Transfer** vol. 117(2), pp. 256-263
- BARLETTA, A., e ZANCHINI, E., 1997. "Hyperbolic heat conduction and local equilibrium: second law analysis", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 40, pp.1007-1016.
- BARRON, B. R., e DAI W., 2006. "A Hybrid FE-FD Scheme for Solving Parabolic Two-Step Micro Heat Transport Equations in an Irregularly Shaped Three Dimensional Double-Layered Thin Film", **Numerical Heat Transfer Fundamentals** vol. 49(5) pp. 437-465. DOI: 10.1080/10407790500511096.
- BASIRAT, H., GHAZANFARIAN, J., e FOROOGHI, P., 2006. "Implementation of dual-phase-lag model at different Knudsen numbers within slab heat transfer", in: **Proceedings of the International Conference on Modeling and Simulation (MS06)**, Konia, Turkey, pp. 895–899.
- BATALHA, G. F.; CERVEIRA, R. L. L. P.; SILVA, F. R. D. A., 2005. "Simulação de processos de micro fabricação: influência do efeito da escala", **Congresso Brasileiro de Engenharia de Fabricação**. Joinville, COBEF. Rio de Janeiro: ABCM, 2005.

- BATTAGLIA, J. L., & MAILLET, D., 2011,. **Modeling in heat transfer Thermal Measurements and Inverse Techniques**, 1.CRC Press, Taylor e Francis, Boca Raton, FL.
- BECK, J. AND ARNOLD, K., 1977. **Parameter Estimation in Engineering and Science**, Wiley Interscience, New York.
- BROWN, J. B. CHUNG, D. Y., e MATHEUS, O.W., 1966. "Heat Pulses at Low Temperatures", **Phys. Let.**, Vol. 21, pp. 241-243.
- CAREY, V. P., CHEN, G., GRIGOPOULOS, C., KAVIANY, M., e MUJUMDAR, A., 2008. **Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering**, Taylor & Francis.
- CATTANEO, M.C., 1948. "Sulla conduzione del calore", **Atti Sem. Mat. Fis. Univ. Modena**, vol. 3, pp. 83-101.
- CATTANEO, M.C., 1958. "Sur une forme de l'equation de la chaleur eliminant le paradoxd'une propagation instantanee", **Comptes Rendus Hebd. Seances Acad. Sci.**, vol. 247, pp.431-433.
- CHEN, G., 2001. "Ballistic-diffusive equations for transient heat conduction from nano to macroscale", **ASME J. Heat Transfer** vol.124, pp. 320-328.
- CHEN, G., 2001. "Ballistic diffusive heat conduction equations", **Phys. Rev. Lett.**vol.86 (11), pp. 2297-2300.
- CHEN, H.-T., e LIN, J.-Y., 1993. "Numerical analysis for hyperbolic heat conduction", **Int J. Heat Mass Transfer** vol.36 (11), pp. 2891-2898.
- COLEMAN, B.D., FABRIZIO, M., e OWEN, D. R., 1982. "On the Thermodynamics of second sound in dielectric crystals", **Arch. Rat. Mech. Anals**, vol. 80, pp. 135-158.
- DIMOV, STEFAN, e WOLFGANG MENZ, 2005, **First International Conference on Multi-Material Micro Manufacture**. Elsevier,
- EHLERS, R.S., 2003. "Introdução a Inferência Bayesiana", Departamento de Estatística, Universidade Federal do Paraná.
- ENGL, H. W., HANKE, M. e NEUBAUER, A., 1996. **Regularization of Inverse Problems: Mathematics and its Applications**, Kluwer Academic Publishers Group

- GAMERMAN, D., e LOPES, H.F., 2006. **Markov Chain Monte Carlo: Stochastic Simulation for Bayesian Inference**, Chapman & Hall/CRC, 2nd edition, Boca Raton, FL.
- GEMBAROVIC, J., e MAJERNIK, V., 1988. "Non-Fourier propagation of heat pulses in finite medium", **Int. J. Heat and Mass Transfer**, vol. 31, (5), pp. 1073-108.
- GHAZANFARIAN, J., e ABBASSI A., 2012. "Investigation of 2D transient heat transfer under the effect of dual phase-lag model in a nanoscale geometry", **Int. J. Thermophysics** vol. 33, no. 3, pp. 552-566.
- GHAZANFARIAN, J., SHOMALI, Z., 2012. "Investigation of dual-phase-lag heat conduction model in a nanoscale metal-oxide-Semiconductor field-effect transistor", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 55, pp. 6231-6237.
- GHAZANFARIAN, J., MOGHADDAM, M., ABBASSI, A., 2015. "Development of Dual-Phase-Lag model for Conjugate Heat Transfer in Nanoscale MOS Devices", **The 23rd Annual International Conference on Mechanical Engineering-ISME2015**.
- GHAZANFARIAN, J., ABBASSI A. e SHOMALI, Z., 2015, "Macro-to Nanoscale Heat and Mass Transfer: The Lagging Behavior", **International Journal of Thermophysics manuscript**
- GOMÈS, S., ASSY, A. e CHAPUIS, P.-O., 2015, "Scanning thermal microscopy: A review", **Phys. Status Solidi A** 212, No. 3, 477–494 (2015) / DOI 10.1002/pssa.201400360
- GOODSON, K. e., E. FLIK, M. I., 1992. "Effect of microscale thermal conduction on the packing limit of silicon-on-insulator electronic devices" **IEEE transactions on components, hybrids, and manufacturing technology**, vol. 15(5), pp. 715-722.
- GRABMANN, A., e PETERS, F., 1999. "Experimental investigation of heat conduction in wet sand", **Int. J. Heat and Mass Transfer**, vol.35, pp. 289-294.
- GUYER, R. A., e KRUMHANSL, J.A. 1996. "Solution of the linearized Boltzmann equation", **Phys. Rev.** 148, pp. 766-778.
- HADAMARD, J., 1923. **Lectures on Cauchy's Problem in Linear Differential Equations**, Yale University Press, New Haven, CT.

- HASTINGS, W.K, 1970. "Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications".
- HAW-LONG LEE, WEN-LIH CHEN, WIN-JIN CHANG, YU-CHING YANG, 2014. "Estimation of energy absorption rate and temperature distributions in short-pulse laser heating of metals with a dual-phase-lag model", **Applied Thermal Engineering** vol. 65, pp.352-360.
- HECTOR, L. G., KIM, W.-S., e OZISIK M.N., 1996, "Propagation and Reflection of thermal waves in a finite medium due to axisymmetric surface sources", **Int. Journal of Heat and Mass Transfer** vol. 35 (4), pp. 897-912.
- HERWIG, H. e BECKERT, K. 2000. "Experimental evidence about the controversy concerning Fourier or non-Fourier heat conduction in materials with a nonhomogeneous inner structure", **Int. J. Heat and Mass Transfer** vol. 36, pp. 387-392.
- INCROPERA, F.P., BERGMAN, T.L., DEWITT, D.P., 2008. **Fundamentos de transferência de calor e de massa**, 6ª ed., Editora LTC, Rio de Janeiro-RJ.
- JING FAN E LIQIU WANG, 2015, "Analytical Theory of Bioheat Transport", **International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer**, May 25-29, 2015, Rutgers University, Piscataway, USA
- JOSEPH, D.D., PREZIOSI, L., 1989. "Heat Waves", **Rev. Mo. Phys.** 61, pp 41-73.
- JOU, D., e LEBON, G., 1996. **Extended Irreversible Thermodynamics**, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.
- KAPIO, J. and SOMERSALO, E., 2004. **Statistical and Computational Inverse Problems**, Applied Mathematical Sciences 160, Springer-Verlag.
- KAPIO, J., FOX, C., 2011. "The Bayesian Framework for Inverse in Problems Heat Transfer", **Heat Transfer Engineering**, vol. 32, n. 9, pp. 718-753.
- KORNER, C., e BERGMANN, H. W., 1998. "The physical defects of the hyperbolic heat conduction equation", **Appl. Phys. A**, vol. 67, pp. 397-40.
- KAMINSKI, W., 1990, "Hyperbolic heat conduction equation for materials with a nonhomogeneous inner structure", **Journal of Heat Transfer** vol. 112(3), pp. 555-560.

- KIM, K., e GUO, Z., 2007. “Multi-time-scale heat transfer modeling of turbid tissues exposed to short-pulsed irradiations”, **Computer methods and programs in Biomedicine**, vol. 86(2), pp.112-123.
- KIM, K., JEONG, W., LEE, W. e REDDY P., 2012, “Ultra-High Vacuum Scanning Thermal Microscopy for Nanometer Resolution Quantitative Thermometry”, **ACS Nano**, vol. 6 no. 5 pp. 4248–4257
- KUNADIAN, I., 2004. **Numerical Investigation of Thermal Transport Mechanisms during ultra-fast laser heating of nano-films during 3-d dual phase lag (DPL) model**, Tese de Mestrado da Universidade de Kentucky.
- KYUNGHAN KIM, ZHIXIONG GUO, 2007. “Multi-time-scale heat transfer modeling of turbid tissues exposed to short-pulsed irradiations”, **Computer Methods and programs in biomedicine** vol. 8 no. 6 pp. 112–123
- LEWANDOWSKA, M., e MALINOWSKI, L, 2006, “An analytical solution of the hyperbolic heat conduction equation for the case of a finite medium symmetrically heated on both sides”, **International Communications in Heat and Mass Transfer**. Vol.33, pp. 61-69
- MAJCHRZAK, E. e MOCHNACKI, B., 2014. “Sensitivity Analysis of Transient Temperature Field in Microdomains with respect to the dual-phase-lag Model Parameters”, **Journal for Multiscale Computational Engineering**, 12 (1) pp. 65–77.
- MEGAN J., SHREYA R., KYUNGHAN K., KUNAL M., ZHIXIONG G., 2008, “Bio-heat transfer analysis during short pulse laser irradiation of tissues”, **International Journal of Heat and Mass Transfer** vol. 51 pp. 5511–5521
- METROPOLIS, N. ROSENBLUTH, A. W. ROSENBLUTH, M. N., TELLER., A. H., AND TELLER, E., 1953, “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines”, **The Journal of Chemical Physics**, vol. 21, no. 6, pp. 1087-1092
- MOGHADDAM, M., GHAZANFARIAN, J., ABBASSI, A., 2014. “Implementation of DPL-DD model for the simulation of nanoscale MOS devices”, **IEEE Trans. Electron Devices**, vol. 61(9), pp. 3131-3138.
- MOCHNACKI, B. e PARUCH, M., 2013. “Cattaneo-Vernotte Equation Identification of Relaxation time using evolutionary algorithms”, **Journal of Applied Mathematics and Computational Mechanics** vol. 12(4) pp. 97-102
- MOCHNACKI, B. e PARUCH, M., 2013, “Estimation of relaxation and thermalization times

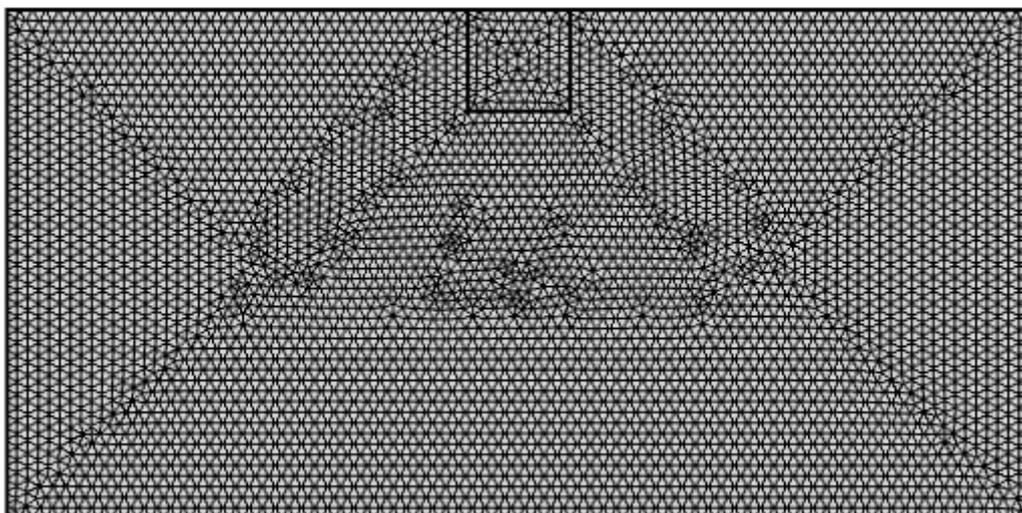
- in microscale heat transfer model”, **Journal of Theoretical and Applied Mechanics** vol. 51, 4, pp. 837-845, Warsaw
- MOOSAIE, A., 2008. “Non-Fourier heat conduction in a finite medium with insulated Boundaries and arbitrary initial conditions”, **Int. Comm. in Heat and Mass Transfer** vol. 35, pp 103-111.
- NASRI, F., BENAÏSSA, M.F., BELMABROUK, H., 2015. “Effect of second-order temperature jump in Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor with Dual-Phase-Lag model”, **Microelectronics Journal** 46, pp.67–74.
- NÓBREGA, P. H. A. ORLANDE, H. R. B.; BATTAGLIA, J-L, 2011. “Bayesian Estimation of Thermophysical Parameters of Thin Metal Films Heated by Fast Laser Pulses”, **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 38, p. 1172-1177.
- MONTGOMERY, D.C., 1997. **Design and Analysis of Experiments**. 4th Edition, Wiley, New York.
- ORLANDE, H.R.B., 2015. “The use of techniques within the Bayesian Framework of Statistics for the Solution of Inverse Problems”, **Tutorial from Metti 6 Advanced School: Thermal Measurements and Inverse Techniques**, Biarritz, France.
- ORLANDE, H. R. B., FUDYM, O., MAILLET, D., COTTA, R. M., 2011, **Thermal Measurements and Inverse Techniques**, CRC Press, Boca Raton,.
- ORLANDE, H.R.B., OZISIK, M.N., TZOU, D.Y., 1995. “Inverse analysis for estimating the electron–phonon coupling factor”, **J. Appl. Phys.** Vol. 78, pp. 1843–1899.
- OZISIK, M. N., 1993. **Heat Conduction**. 2nd edition, Wiley, New York.
- OZISIK M. N. e ORLANDE H. R. B., 2000. **Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications**, Taylor and Francis, New York.
- OZISIK M. N. e B. Vick, 1984, "Propagation and Reflection of thermal waves a finite medium," **Int. J. Heat Mass Transfer**, vol. 27, (10), pp. 1845-1854.
- PADDOCK, C. A., e EESLEY, G. L., 1986, **J. Appl. Phys**, 60, 285.
- PENNES, H. H., 1948, “Analysis of Tissue and Arterial Blood Temperatures in the Resting Human Forearm”, **Journal of Applied Physiology** vol. 1 no. 2, 93-122
- POP, E., 2010, “Energy Dissipation and Transport in Nanoscale Devices”, **Nano Research** vol. 3, 147.
- QIU, T e TIEN, C. L., 1992, “Short Pulse Laser Heating on Metals”, **Int. Journal Heat Transfer** vol. 37 pp. 719-726

- QIU, T. Q., JUHASZ, T., SUAREZ, C., BRON, W. E., e TIEN, C. L., 1994, “Femtosecond laser heating of multi-layered metals-II. Experiments”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, 37, pp. 2799-2808.
- QIU, T. Q., TIEN, C. L., 1993. “Heat transfer mechanisms during short-pulse laser heating of metals”, **ASME Journal of Heat Transfer**, vol.115, pp. 835-841.
- REZENDE, S. M., 2004. **Materiais e Dispositivos Eletrônicos**, 2. Ed. São Paulo, Editora Livraria da Física
- SAGHATCHI, R., GHAZANFARIAN, J., 2015. “A novel SPH method for the solution of Dual-Phase-Lag model with temperature-jump boundary condition in nanoscale”, **Applied Mathematical Modelling** vol. 39 pp.1063–1073
- SHIH T.C., HORNG T. L, HUANG H. W., JU K. C., HUANG, T.C., CHEN P.Y., HO Y. J., LIN W. L., 2012. “Numerical analysis of coupled effects of pulsatile blood flow and thermal relaxation time during thermal therapy”, **International Journal of Heat and Mass Transfer** vol. 55 pp. 3763–3773
- SHEN, B., e ZHANG, P., 2008. “Notable physical anomalies manifested in non-Fourier heat conduction under the dual-phase-lag model”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 51, pp. 1713-1727.
- SUMIT KUMAR E ATUL SRIVASTAVA, 2015, “Numerical Investigation of Thermal Response of Biological Tissues Based on the dual-phase-lag bio-heat transfer model during laser-based photo-thermal therapy”
- TAITEL, Y., 1972, “On the Parabolic, hyperbolic and discrete formulation of the heat conduction equation”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 15, pp.369-371
- TAN, S., FOZ, C., e NICHOLLS, G., 2006, **Inverse Problems: Course Notes for Physics**, Taylor and Francis, New York.
- TANG, D. W., e ARAKI, N., 1996, “Analytical solution of Non-Fourier temperature response in a finite medium under laser-pulse heating”, **Heat Mass Transfer** vol. 31, pp. 359-363
- TANG DAWEI, ARAKI NOBUYUKI, YAMAGISHI NOHIRO, 2007, “Transient Temperature Responses in Biological Materials under pulsed IR radiation”, **Heat Mass Transfer**, 43:579-585
- TIEN, C. L., e CHEN, G., 1992, “Challenges in Microscale Radiative and Conductive Heat Transfer”, **Fundamental Issues in Small Heat Transfer**, vol. 227.

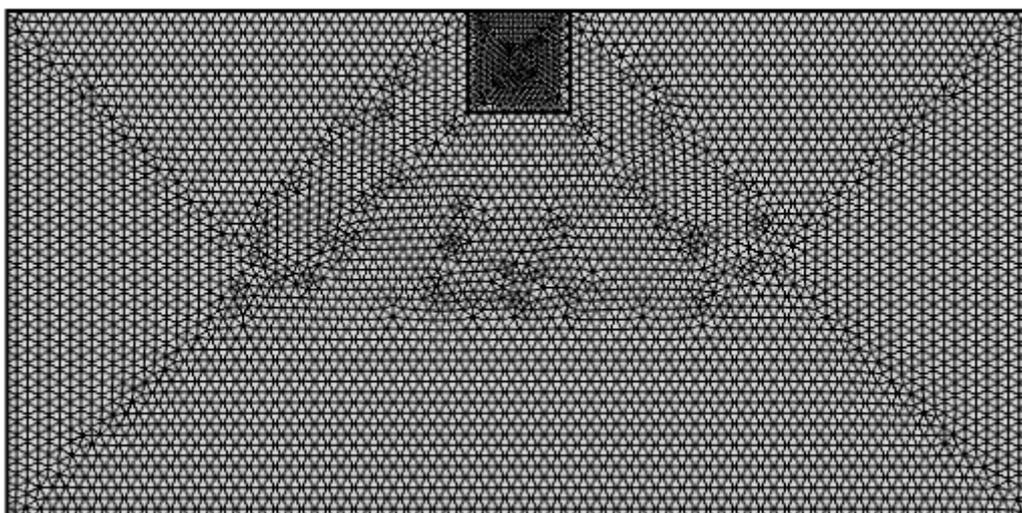
- TIKHONOV A.N., ARSEININ V.Y., 1977. **Solution of ill-posed problems**, Winston & Sons, Washington, DC.
- TZOU, D. Y., 2015. **Macro- to Micro-scale Heat Transfer: the Lagging Behaviour**, Taylor & Francis, New York, 2edition
- TZOU, D.Y., 1995, “A Unified Field Approach for Heat Conduction From Macro- to Micro-Scales”, **ASME. Journal of Heat Transfer**. Vol. ;117(1):8-16. doi:10.1115/1.2822329.
- TZOU, D. Y., CHIU, K. S., 2001. “Temperature-dependent thermal lagging in ultrafast laser heating”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 44, pp. 1725-1734.
- VEDAVARZ A., KUMAR S. e MOALLEMI M. K., 1994. “Significance of Non-Fourier Heat Waves”, **Journal of Heat Transfer**. Vol. 116. pp. 221- 224
- VERNOTTE, P., 1958, “Les Paradoxes de la Théorie Continue de l'équation De La Chaleur,” **Compte Rendus**, Vol. 246, pp. 3154-3155.
- WANG, L., ZHOU X., WEI, X., 2008, **Heat Conduction: Mathematical Models and Analytical Solutions**, Springer.
- WELLELE, O. J. M., 2007, **Planejamento de Experimento para Identificação de Propriedades Termofísicas de materiais Semitransparentes**. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- WILLIAMS, C., e WICKRAMASINGHE, H., “Scanning Thermal Profiler” 1986, **Appl. Phys. Lett.** vol.49(23),pp. 1587–1589.
- WU, T.-S., LEE H.-L., CHANG W.-J., YANG Y.-C., 2015, “An inverse hyperbolic heat conduction problem in estimating pulse heat flux with a dual-phase-lag model”, **International Communications in Heat and Mass Transfer** vol. 60 pp.1–8
- XU FF., LU TJ., SEFFEN KA, NG EK, 2009. “Mathematical Modeling of Skin Bioheat Transfer. ASME” **Appl. Mech.** vol. 62(5):050801-050801-35. doi:10.1115/1.3124646.
- XU, M., WANG, L., 2005. “Dual-Phase-lagging heat conduction based on Boltzmann transport equation, International Journal of Heat and Mass Transfer”, vol.48, pp. 5616-5624
- YANG, C., 2014. “Estimation of the heat source of laser pulses by a dual-phase-lag model”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 73 pp. 358–364
- YANG, R., CHEN, G., LAROCHE, M., TAUR, Y., 2005. “Simulation nanoscale multidimensional transient heat conduction problems using ballistic diffusive equations and phonon Boltzmann equation”, **ASME J. Heat Transfer** vol. 127 pp. 298–306.
- ZHANG, Z.M., **Nano/Microscale Heat Transfer**, McGraw-Hill, New York, 2007

APÊNDICE I

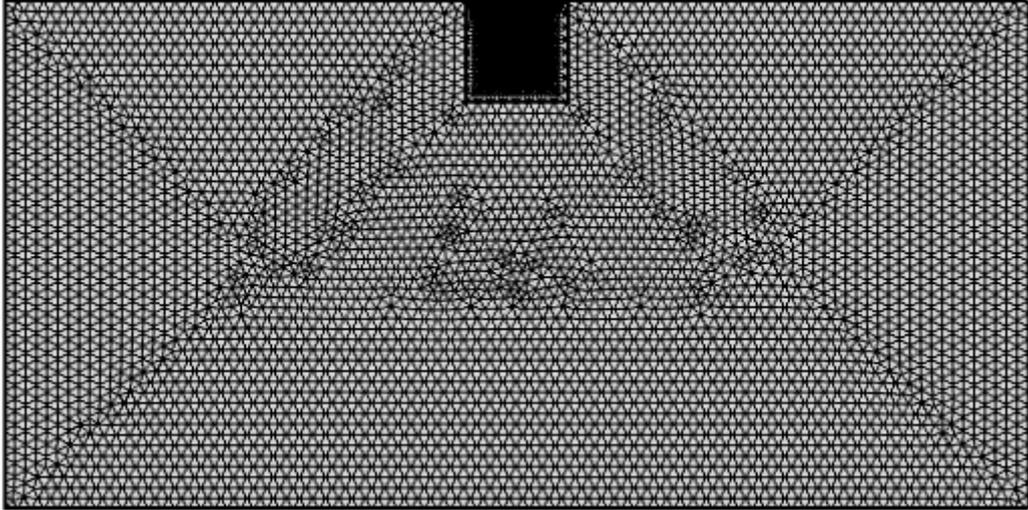
Malhas utilizadas para a convergência espacial apresentada no Capítulo VI.



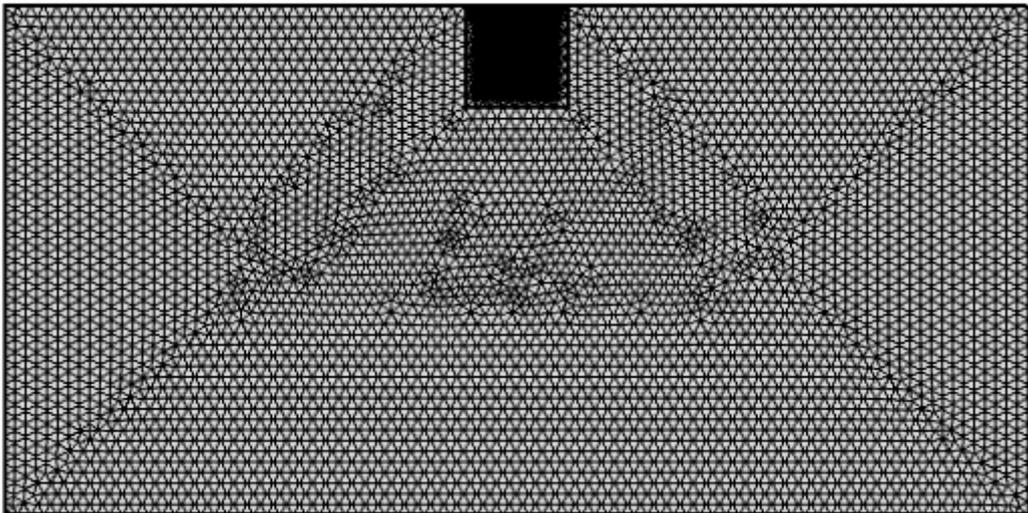
Malha 1



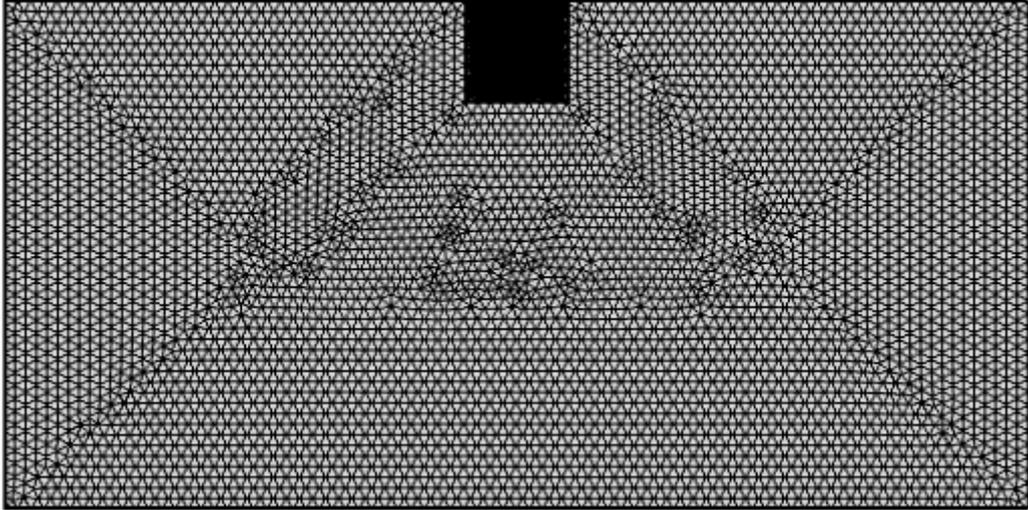
Malha 2



Malha 3



Malha 4



Malha 5

APÊNDICE II

Desenvolvimento da equação de contorno do terceiro tipo do Modelo de Condução de calor de Duplo Retardo.

Seja a equação da equação constitutiva do Modelo de Condução de Duplo Retardo dado por:

$$\mathbf{q} + \tau_q \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -k \left(\nabla T + \tau_r \frac{\partial (\nabla T)}{\partial t} \right) \quad (1)$$

Fazendo o balanço de energia para uma condição de contorno do terceiro tipo na superfície, temos:

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} + h(T_{env} - T) = 0 \quad (2)$$

onde h é o coeficiente de convecção e T_{env} é a temperatura do envoltório.

Para h e T_{env} constantes:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \cdot \mathbf{n} - h \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

Fazendo o produto escalar da Eq. (1) com (\mathbf{n}) temos:

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} + \tau_q \frac{\partial \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}}{\partial t} \cong -k \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} + \tau_r \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right) \right) \quad (4)$$

onde

$$\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} + \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (5)$$

Substituindo a Eq. (2) e (3) na Eq. (4) temos:

$$k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} + hT + k\tau_T \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right) + \tau_q h \frac{\partial T}{\partial t} = hT_{env} \quad (6)$$

Adimensionalizando a Eq. (6) com parâmetros dados pela Eq. (5.4) e com $Bi = hL_h / k_{ref}$ temos a seguinte condição de contorno:

$$k^* \frac{\partial T^*}{\partial \mathbf{n}^*} + BiT^* + k^* \tau_T^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial T^*}{\partial \mathbf{n}^*} \right) + \tau_q^* Bi \frac{\partial T^*}{\partial t^*} = BiT_{env}^* \quad (7)$$

Comparando a Eq. acima com a Eq. (5.17), presente no Capítulo V, percebemos que elas possuem o mesmo formato:

$$k^* \frac{\partial T^*}{\partial \mathbf{n}^*} + \frac{1}{d_1 Kn} T^* + k^* \tau_T^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial T^*}{\partial \mathbf{n}^*} \right) + \tau_q^* \frac{1}{d_1 Kn} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{1}{d_1 Kn} T_w^* \quad (5.17)$$

APÊNDICE III

Desenvolvimento da equação da condição de contorno de isolamento do Modelo de Condução de calor de Duplo Retardo.

Seja a equação da equação constitutiva do Modelo de Condução de Duplo Retardo dado por:

$$\mathbf{q} + \tau_q \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -k \left(\nabla T + \tau_r \frac{\partial (\nabla T)}{\partial t} \right) \quad (1)$$

Tendo a condição de contorno de isolamento em uma superfície, temos:

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2)$$

Fazendo $(\mathbf{n}) = 0$ na Eq. (1), temos:

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} + \tau_q \frac{\partial \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}}{\partial t} \cong -k \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} + \tau_r \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right) \right) \quad (3)$$

Substituindo a Eq. (2) e sua derivada na Eq. (3), temos:

$$\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} + \tau_r \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right) = 0 \quad (4)$$

Utilizando os parâmetros adimensionais descritos no Capítulo V, pela Eq. (5.4), temos a seguinte condição de isolamento adimensional:

$$\frac{\partial T^*}{\partial x^*} + \tau_r^* \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) = 0 \quad (5)$$

APÊNDICE IV

Na Figura 1a encontra-se a divisão dos coeficientes de sensibilidade reduzidos da difusividade térmica e do tempo de relaxação devido ao gradiente de temperatura em relação ao tempo adimensional, enquanto que na figura 1b encontra-se a divisão dos coeficientes de sensibilidade reduzidos da difusividade térmica e do tempo de relaxação devido ao fluxo de calor em relação ao tempo adimensional. Verifica-se através da Figura (1a) que os parâmetros são linearmente dependentes, possuindo uma independência linear apenas em um período de tempo muito curto bem no início da simulação. Enquanto que na Figura (1b), verifica-se uma independência linear apenas em um breve período de tempo entre os tempos adimensionais 10 e 20 enquanto que no restante do tempo os parâmetros apresentam forte dependência linear.

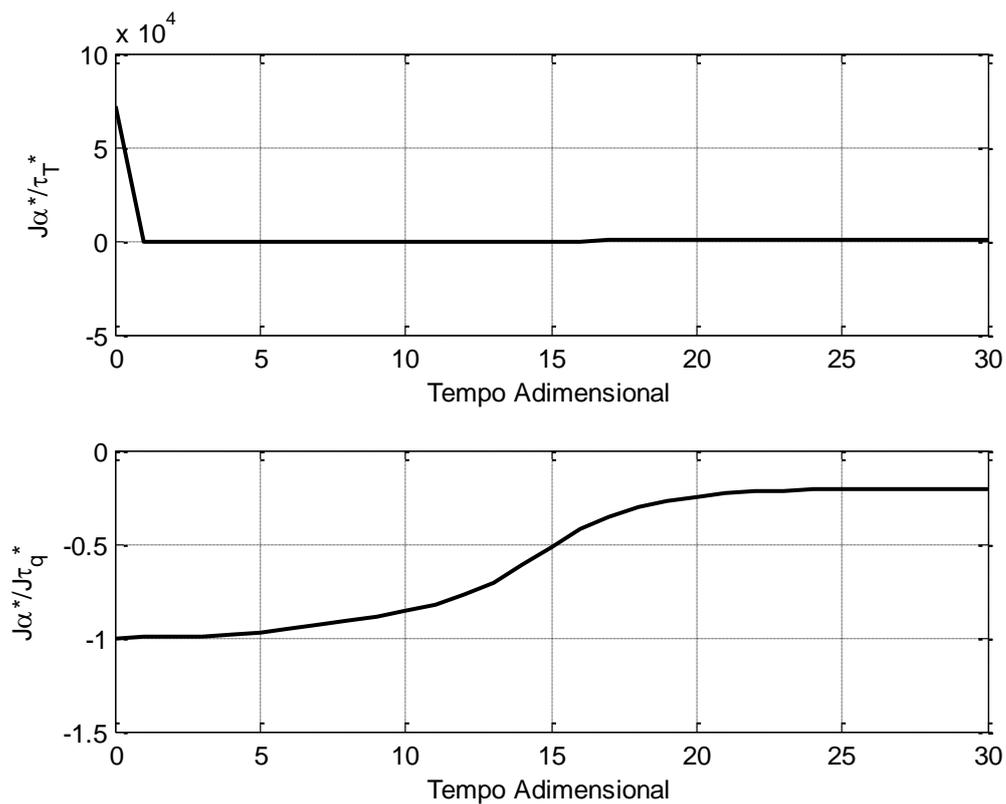


Figura 1a: Divisão dos coeficientes de sensibilidade reduzidos da difusividade térmica e do tempo de relaxação devido ao gradiente de temperatura. Figura 1b: Divisão dos coeficientes de sensibilidade reduzidos da difusividade térmica e do tempo de relaxação devido ao fluxo de calor

A Figura (2) apresenta a divisão entre os coeficientes de sensibilidade reduzidos do tempo de relaxação devido ao gradiente de temperatura e ao fluxo de calor em relação ao tempo. Verifica-se através da Figura (2) que os parâmetros referentes aos tempos de relaxação não são linearmente dependentes, sendo desta maneira possível sua estimação simultânea.

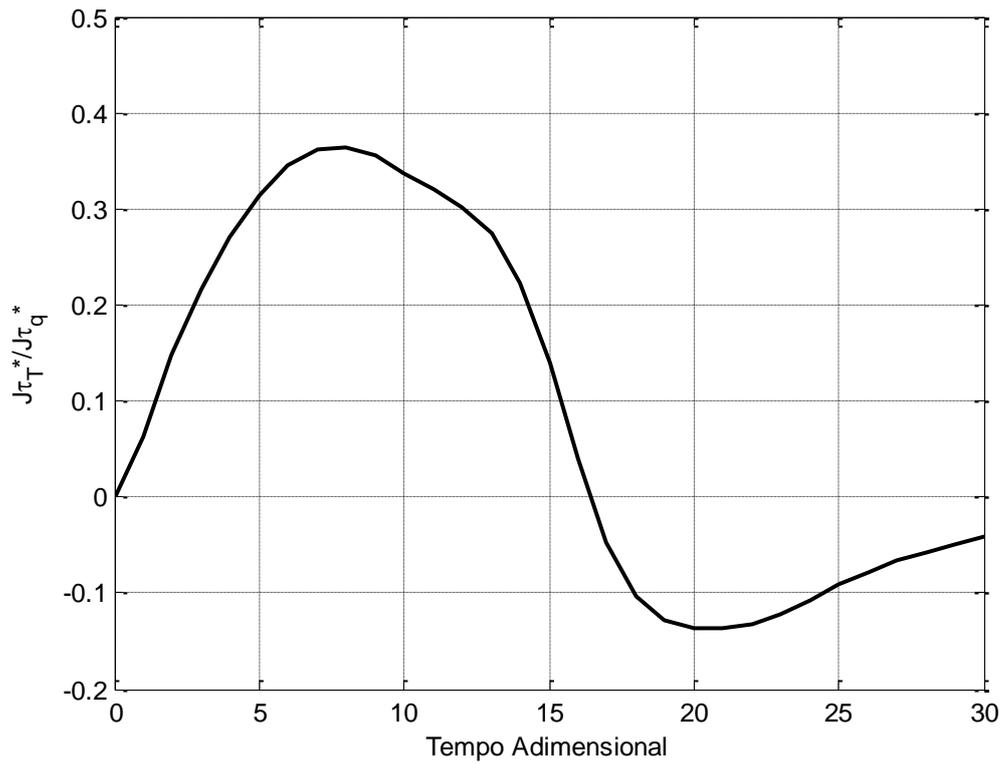


Figura 2: Divisão do coeficiente de sensibilidade reduzidos do tempo de relaxação devido ao gradiente de temperatura e ao fluxo de calor